

**UNIVERSIDADE DO VALE DO RIO DOS SINOS
UNIDADE ACADÊMICA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
NÍVEL MESTRADO**

JOSÉ HENRIQUE NAZZI EHMS

**COMPARAÇÃO DE MODELOS NUMÉRICOS DE MALHA FIXA BASEADOS EM
ENTALPIA PARA OS PROCESSOS DE FUSÃO E DE SOLIDIFICAÇÃO DE PCM
EM ESFERA**

**SÃO LEOPOLDO
2018**

José Henrique Nazzi Ehms

COMPARAÇÃO DE MODELOS NUMÉRICOS DE MALHA FIXA BASEADOS EM
ENTALPIA PARA OS PROCESSOS DE FUSÃO E DE SOLIDIFICAÇÃO DE PCM EM
ESFERA

Trabalho apresentado como pré-requisito
parcial para a obtenção do título de Mestre em
Engenharia Mecânica, pelo Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Mecânica da
UNISINOS

Orientadora: Prof^ª. Dr^ª. Rejane De César Oliveeski

Coorientador: Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Elizaldo Domingues dos Santos

Prof^ª. Dr^ª Flávia Schwarz Franceschini Zinani

Prof^ª. Dr^ª Jacqueline Biancon Copetti

SÃO LEOPOLDO

2018

E33c Ehms, José Henrique Nazzi.

Comparação de modelos numéricos de malha fixa baseados em entalpia para os processos de fusão e de solidificação de PCM em esfera / José Henrique Nazzi Ehms – 2018.

159 f. : il. ; 30 cm.

Dissertação (mestrado) – Universidade do Vale do Rio dos Sinos, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2018.

“Orientadora: Prof^a. Dra. Rejane De César Oliveeski
Coordenador Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha”

1. Fluidodinâmica computacional (CFD). 2. Fusão se contato. 3. Materiais de mudança de fase (PCM). 4.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(Silvana Teresinha Dornelles Studzinski – CRB 10/2524)

RESUMO

Armazenamento térmico apresenta grande potencial de utilização em diversas aplicações, como energia solar, climatização, conservação de alimentos ou aproveitamento de calor residual em processos industriais. O armazenamento térmico de calor latente é realizado com materiais de mudança de fase (PCM), através dos processos de fusão e solidificação. A representação destes processos através de simulação numérica é realizada com o acréscimo ao modelo matemático básico, composto pelas equações da conservação da massa, quantidade de movimento e energia, modelos para descrever o calor latente e a transição na velocidade entre as fases, tais como: Darcy STM (*source term method*), VVM (*variable viscosity method*) e SOM (*switch-off method*). No entanto, a grande maioria das pesquisas nesta área utiliza o primeiro método. Além disso, são poucos os estudos comparativos de diferentes métodos para descrever processos de mudança de fase. Assim, o objetivo do presente estudo é comparar os métodos Darcy STM, VVM e misto (utilizando elementos dos dois anteriores) na simulação numérica de processos de fusão e de solidificação do PCM RT27 no interior de uma esfera. O estudo foi realizado utilizando-se fluidodinâmica computacional, através do método dos volumes finitos. O Modelo numérico foi validado com resultados experimentais da literatura. Os resultados quantitativos e qualitativos de fração líquida mostram que o método Darcy STM é mais adequado ao processo de solidificação, enquanto o método VVM produz resultados mais próximos aos experimentais no processo de fusão. O custo computacional foi menor para o método Darcy STM e maior para o método VVM, enquanto o método misto apresenta custo computacional pouco inferior ao do método VVM. Na análise da camada líquida na fusão de contato, foram analisadas a velocidade descendente do sólido, a espessura da camada e a vazão na camada. Os resultados referentes a camada líquida indicaram significativa influência das configurações do método Darcy STM. No entanto, são pouco influenciados pelas configurações do método VVM.

Palavras-chave: Materiais de mudança de fase (PCM), Modelagem numérica, Solidificação, Fusão de contato (*close contact melting*), Fluidodinâmica computacional (CFD).

ABSTRACT

Thermal energy storage presents great potential of utilization in several applications, such as solar energy, HVAC systems, food conservation or waste heat recovery in industrial processes. Latent heat thermal energy storage is realized with phase change materials (PCM), through solidification and melting processes. Representation of such processes through numerical simulation is performed with the addition to the basic numerical model, composed of the conservation equations of mass, momentum and energy, models to account the latent heat and the velocity transition between the phases, such as: Darcy STM (source term method), VVM (variable viscosity method) and SOM (switch-off method). However, the large majority of the research on such area employ the first method. Besides that, there are few comparative studies of different methods to describe phase change processes. Thus, the objective of the present work is compare Darcy STM, VVM and mixed method (using elements of the two prior) in the simulation of melting and solidification processes of PCM RT27 inside a sphere. The study was realized using computational fluid dynamics, with the finite volume method. The numerical model was validated with experimental results from literature. Quantitative and qualitative results of liquid fraction show that Darcy STM is most suitable to solidification process, while VVM produces results closer to experimental in the melting process. Computational cost was smaller for Darcy STM and greater for VVM, while mixed method presents computational cost slightly lower than the one of VVM. In the analysis of the liquid layer in close contact melting, were analyzed descending velocity of the solid, liquid layer thickness and the flow in the liquid layer. The results regarding the liquid layer denote significant influence of the configurations for Darcy STM. However, such results are little influenced by the configurations of VVM.

Key-words: Phase change materials (PCM), Numerical modelling, Close contact melting, Solidification, Computational fluid dynamics (CFD).

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Energia armazenada na forma de calor sensível e latente em função da temperatura.....	23
Figura 2.2 – Classificação dos PCM conforme sua composição.....	26
Figura 3.1 – Variação da entalpia nos processos de mudança de fase isotérmica e com propriedades contínuas.	30
Figura 3.2 – Solidificação de água no interior de tubo horizontal analisado por Viskanta e Gau (1982) nos instantes: (a) inicial, (b) $t = 6$ min e (c) $t = 18$ min.	32
Figura 3.3 – Exemplo de processo de fusão em cavidades retangulares com aquecimento na superfície lateral (Shokouhmand e Kamkari, 2013).....	33
Figura 3.4 – Processo de fusão em cilindro vertical (Katsman et al., 2007) para $t = 14, 16, 18, 20$ e 22 min.	34
Figura 3.5 – Formato do sólido na fusão de contato mostrado no estudo de Hirata, Makino e Kaneko (1991).	35
Figura 3.6 – Fusão de PCM em cilindro horizontal analisado por Sparrow e Geiger (1986): (a) vista longitudinal para o caso com sólido fixo, (b) vista transversal para o caso com sólido fixo e (c) vista transversal para o caso com sólido livre.....	36
Figura 3.7 – Fusão de PCM em esfera analisada por Tan (2008): (a) sólido livre e (b) sólido fixo.....	37
Figura 3.8 – escoamento do líquido na fusão de contato em esfera	38
Figura 4.1 – Classificação dos modelos de calor latente.....	41
Figura 4.2 – Classificação dos modelos de transição de velocidade entre as fases líquida e sólida.....	44
Figura 5.1 – Fluxograma do processo iterativo utilizado no método SIMPLE.....	53
Figura 6.1 – Geometria analisada no presente trabalho.....	57
Figura 7.1 – Variação da viscosidade em função da fração líquida nas funções utilizadas no método VVM com $\omega = 0,001$	63
Figura 7.2 – Malha computacional: (a) integral e (b) detalhe do refino junto da parede.	68
Figura 7.3 – Variáveis utilizadas na análise da fusão de contato.	73
Figura 8.1 – Fração líquida ao longo do tempo na solidificação para diferentes valores de C no presente trabalho e nos resultados de Assis, Ziskind e Letan (2009).....	79

Figura 8.2 – Campos de fração líquida de RT27 do presente trabalho e resultados numéricos e experimentais de Assis, Ziskind e Letan (2009), para $t = 5, 10, 15, 20$ e 25 min; $C = 10^6$ à 10^{12}	80
Figura 8.3 – Campos de fração líquida e massa específica, com isothermas sobrepostas à região de mudança de fase, para $C = 10^{12}$ em: (a) $t = 10$ min e (b) $t = 20$ min.	82
Figura 8.4 – Perfil de velocidade vertical na região sólida na linha horizontal central para os valores de C testados em $t = 30$ min.	82
Figura 8.5 – Formato da interface ar-PCM ao final do processo de solidificação para os diferentes valores de C testados.	83
Figura 8.6 – Fluxo de calor local ao longo da parede da esfera para os valores de C testados em $t = 10$ min no processo de solidificação.	84
Figura 8.7 – Campos de fração líquida em $t = 40$ s para o método VVM utilizando: (a) Eq. (7.8), (b) Eq. (7.9) e (c) método Darcy STM com $C = 10^8$	85
Figura 8.8 – Fração líquida ao longo do tempo no processo de solidificação para o método misto e para a correlação de Assis, Ziskind e Letan (2009).	86
Figura 8.9 – Fração líquida ao longo do tempo no processo de solidificação, para os métodos misto e Darcy STM em comparação com os dados experimentais e com a correlação de Assis, Ziskind e Letan (2009).	87
Figura 8.10 – Espessura da camada de transição no processo de solidificação para as 4 malhas testadas.	89
Figura 8.11 – Taxa de resolução para os métodos de discretização testados no processo de solidificação.	92
Figura 8.12 – Taxa de resolução para os métodos de acoplamento pressão-velocidade testados no processo de solidificação.	92
Figura 8.13 – Fração líquida ao longo do tempo para diferentes valores de C no presente trabalho e nos resultados de Assis et al. (2007).	94
Figura 8.14 - Campos de fração líquida na fusão de RT27 do presente trabalho com $C = 10^4$ à 10^5 e resultados numéricos e experimentais de Assis et al. (2007), para $t = 2, 5, 10, 15, 20$ e 25 min.	95
Figura 8.15 – Campos de fração líquida e vetores de velocidade para $C = 10^5$ e $t = 25$ min.	96
Figura 8.16 – Campos de fração líquida e vetores de velocidade com $C = 2 \times 10^4$ em $t = 20$ min para as malhas de: (a) 3918 elementos e (b) 18210 elementos.	97
Figura 8.17 – Fluxo de calor médio na parede ao longo do tempo, para os valores de C testados no método Darcy STM.	98

Figura 8.18 – Fluxo de calor ao longo da parede da esfera no processo de solidificação em $t = 10$ min para os valores de C testados no método Darcy STM.	98
Figura 8.19 – Fração líquida ao longo do tempo no processo de fusão de RT27 para as funções testadas para descrever a viscosidade no método VVM.	99
Figura 8.20 – Campos de fração líquida na fusão de RT27 do presente trabalho utilizando o método VVM com as duas funções testadas e resultados numéricos e experimentais de Assis et al. (2007), para $t = 2, 5, 10, 15, 20$ e 25 min	100
Figura 8.21 – Campos de fração líquida e vetores de velocidade normalizados na fusão de RT27 com $D = 80$ mm e $t = 4$ s utilizando o método VVM com a Eq. 7.9: (a) todo o domínio, (b) detalhe da região superior e (c) detalhe da região inferior.....	102
Figura 8.22 – Tensão de cisalhamento em função da posição no eixo x na parede da esfera para $C = 2 \times 10^4$ e para as duas funções testadas no método VVM para: (a) $t = 4$ s e (b) $t = 20$ s.	103
Figura 8.23 – Campos de fração líquida na fusão de RT27 do presente trabalho utilizando o método misto e resultados numéricos e experimentais de Assis et al. (2007), para $t = 2, 5, 10, 15, 20$ e 25 min	106
Figura 8.24 – Fluxo de calor médio ao longo do tempo no processo de fusão para os casos com o método misto.	107
Figura 8.25 – Fração líquida ao longo do tempo para os resultados numéricos do presente trabalho com os métodos Darcy STM, VVM e misto e para os resultados experimentais e numéricos de Assis et al. (2007).....	108
Figura 8.26 – Fluxo de calor local para os métodos testados em $t = 10$ min.	109
Figura 8.27 – Fluxo de calor médio ao longo do tempo no processo de fusão para os métodos testados.	109
Figura 8.28 – Fração líquida ao longo do tempo na fusão de RT27 considerando a parede da esfera como resistência térmica e considerando a parede da esfera na malha.	111
Figura 8.29 – Taxa de resolução média das simulações para o processo de fusão com os métodos Darcy STM, VVM e misto.....	112
Figura 8.30 – Formato do sólido em $t = 10$ min para as principais configurações dos modelos de mudança de fase testados: (a) Darcy STM; (b) VVM e misto.....	114
Figura 8.31 – Velocidade da porção sólida ao longo do tempo para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da correlação de Bejan (1992).	115
Figura 8.32 – Espessura da camada líquida ao longo do tempo em $\theta = 45^\circ$ para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da Eq. (7.24).....	117

Figura 8.33 – Espessura da camada líquida em função de θ em $t = 5$ min para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da Eq. (7.24).....	118
Figura 8.34 – Vazão na camada líquida ao longo do tempo em $\theta = 45^\circ$ para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da Eq. (7.22).....	119
Figura 8.35 – Vazão na camada líquida em função de θ em $t = 5$ min para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da Eq. (7.22).....	120
Figura 8.36 – Posição angular do final da camada líquida, espessura e vazão na camada líquida nesta posição ao longo do tempo para o método VVM com a malha 4-B.	121
Figura 8.37 – Número de Nusselt global e na camada líquida vs. Fo para o método VVM com a malha 4-B.....	122
Figura 8.38 – Perfil de velocidade na camada líquida em $t = 5$ min nas posições $\theta = 45^\circ$ e 90° para as malhas 2-A e 4-B com o método VVM,	124

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Classificação dos PCM de acordo com a temperatura de mudança de fase	25
Tabela 4.1 – Funções e relações de viscosidade em estudos utilizando o método VVM.	47
Tabela 4.2 – Combinações de formulações utilizadas em estudos de PCM.....	49
Tabela 6.1 – Configurações dos processos analisados no presente trabalho.....	58
Tabela 6.2 – Propriedades dos materiais utilizados no presente trabalho.	59
Tabela 7.1 – Malhas utilizadas no presente estudo.	69
Tabela 7.2 – Resumo dos casos de solidificação analisados no presente trabalho.....	69
Tabela 7.3 – Resumo dos casos de fusão analisados no presente trabalho.	70
Tabela 8.1 – Efeitos dos parâmetros testados na convergência, na tensão máxima de cisalhamento e na deformação do PCM sólido na interface com o ar.....	104

LISTA DE SIGLAS

CFD	Fluidodinâmica computacional (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
GCI	Índice de convergência de malha (<i>grid convergence index</i>)
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
PCM	Materiais de mudança de fase (<i>phase change materials</i>)
PISO	<i>Pressure-Implicit with Splitting of Operators</i>
PRESTO	<i>Pressure Staggering Option</i>
RANS	<i>Reynolds-averaged Navier-Stokes</i>
RSOM	Método de "liga-desliga" suavizado (<i>ramped switch-off method</i>)
RSTM	Método de termo fonte suavizado (<i>ramped source term method</i>)
SIMPLE	<i>Semi Implicit Linked Equations</i>
SIMPLEC	SIMPLE <i>Consistent</i>
SIMPLER	SIMPLE <i>Revised</i>
SOM	Método de "liga-desliga" (<i>switch-off method</i>)
STM	Método de termo fonte (<i>source term method</i>)
UDF	Função definida pelo usuário (<i>user-defined function</i>)
UNISINOS	Universidade do Vale do Rio dos Sinos
VOF	Volume de fluido (<i>volume of fluid</i>)
VVM	Método de viscosidade variável (<i>variable viscosity method</i>)

LISTA DE SIMBOLOS

Nomenclatura

A	área	[m ²]
\vec{A}	vetor área	[m ²]
a	coeficiente do centro da célula	[-]
Ar	número de Arquimedes $[Ar = g(\rho_s - \rho_l)r^3/\mu^2]$	[-]
b	contribuição da parte constante do termo fonte	[-]
B	constante numérica	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]
b	contribuição da parte constante do termo fonte	[-]
C	constante da zona porosa (<i>Mushy Zone</i>)	[kg m ⁻³ s ⁻¹]
C_{ap}	calor específico aparente	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]
C_{ef}	calor específico efetivo	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]
CFL	número de Courant-Friedrichs-Lewy $[CFL = u\Delta t/\Delta x]$	[-]
C_p	calor específico	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]
D	diâmetro	[m]
dt	intervalo de tempo	[s]
dt	taxa de avanço da solução no tempo	[s ⁻¹]
e	espessura	[m]
Er	erro relativo	[-]
F	função de discretização espacial	[-]
Fo	número de Fourier $[Fo = k_i t/\rho_l C_{p,l} r^2]$	[-]
Fr	fator de refinamento	[-]
Fr^*	fator de refinamento requerido	[-]
g	aceleração da gravidade	[m s ⁻¹]
GCI	índice de convergência da malha	[-]
GCI^*	índice de convergência da malha requerido	[-]
Gr	número de Grashof $[Gr = g\zeta\Delta T\rho_l^2 r^3/\mu^2]$	[-]
H	altura	[m]
h	entalpia	[J kg ⁻¹]
J	relação entre fatores de refinamento e desvios nos resultados	[-]
k	condutividade térmica	[W m ⁻¹ K ⁻¹]
L	calor latente	[J kg ⁻¹]

l_0	escala de comprimento da camada líquida	[m]
m	massa	[kg]
M	peso molecular	[kg kmol ⁻¹]
\dot{m}	vazão mássica	[kg s ⁻¹]
N	quantidade	[-]
Nu	número de Nusselt [$Nu = \lambda x/k$]	[-]
op	ordem aparente	[-]
P	perímetro	[-]
p	pressão	[Pa]
Pe	número de Péclet [$Pe = u\Delta x/\alpha$]	[-]
Pr	número de Prandtl [$Pr = C_{p,l}\mu/k$]	[-]
Q	vazão	[m ³ s ⁻¹]
q''	fluxo de calor	[W m ⁻²]
R	constante universal dos gases	[J K ⁻¹ mol ⁻¹]
r	raio	[m]
S	termo fonte	[Pa m ⁻¹ ; W m ⁻³]
Ste	número de Stefan [$Ste = C_{p,l}\Delta T/L$]	[-]
T	temperatura	[K]
t	tempo	[s]
tc	tempo computacional	[s]
u	velocidade na direção x	[m s ⁻¹]
V	velocidade	[m s ⁻¹]
\forall	volume	[m ³]
\vec{V}	vetor velocidade	[m s ⁻¹]
x	posição na direção x	[m]
y	posição na direção y	[m]

Símbolos Gregos

α	difusividade térmica	[m ² s ⁻¹]
β	fração líquida	[-]
γ	fração volumétrica	[-]
δ	espessura da camada líquida	[m]
Δ	variação	[-]

Δr_i	vetor que representa a distância entre os centroides das células	[m]
Δt	subintervalo de tempo	[s]
Δx	dimensão da célula computacional	[m]
ε	constante numérica	[-]
ζ	coeficiente de expansão volumétrica	[K ⁻¹]
η	taxa de resolução	[s ⁻¹]
θ	posição angular na análise da camada líquida	[°]
Δ	tamanho representativo da malha	[m]
λ	coeficiente de transferência de calor convectivo	[W m ⁻² K ⁻¹]
μ	viscosidade dinâmica	[kg m ⁻¹ s ⁻¹]
ρ	massa específica	[kg m ⁻³]
τ	tensão de cisalhamento	[Pa]
Φ	variável qualquer no modelo numérico	[-]
Ψ	soma dos resíduos na resolução das equações	[-]
ω	constante numérica que define a variação da viscosidade	[-]

Subíndices

0	posição inicial
a	aproximado
c	constante
dt	intervalo de tempo
$dt+1$	próximo intervalo de tempo
e	energia
esc	escoamento
ex	extrapolado
f	face da célula
g	global
i	célula “ i ”
j	malha “ j ”
k	fluido “ k ”
l	líquido
la	latente
m	mudança de fase
max	máximo

<i>med</i>	médio
<i>n</i>	nó
<i>nb</i>	célula vizinha
<i>op</i>	operação
<i>p</i>	parede
<i>PCM</i>	PCM
<i>qm</i>	quantidade de movimento
<i>ref</i>	referência
<i>s</i>	sólido
<i>sai</i>	saída
<i>sc</i>	superfície de contato
<i>se</i>	sensível
<i>T</i>	total
<i>vel</i>	velocidade
<i>x</i>	posição no eixo x
δ	camada líquida
Δx	dimensão da célula
θ_{max}	posição final da camada líquida
Φ	variável Φ

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	18
1.1 OBJETIVOS.....	19
1.2 JUSTIFICATIVA.....	20
1.3 TRABALHOS DO GRUPO.....	20
1.4 ESTRUTURA DA PESQUISA.....	21
2 MATERIAIS DE MUDANÇA DE FASE – PCM.....	23
2.1 CLASSIFICAÇÃO DOS PCM.....	24
2.2 APLICAÇÕES DE PCM.....	27
3 PROCESSOS DE MUDANÇA DE FASE.....	30
3.1 PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO.....	31
3.2 PROCESSO DE FUSÃO.....	32
4 MODELOS NUMÉRICOS PARA PROCESSOS DE MUDANÇA DE FASE.....	39
4.1 MODELAGEM DO CALOR LATENTE.....	40
4.1.1 Métodos baseados na temperatura.....	41
4.1.2 Métodos com termo fonte.....	43
4.1.3 Métodos baseados na entalpia.....	43
4.2 MODELAGEM DA TRANSIÇÃO DE VELOCIDADE.....	44
4.2.1 Métodos SOM (<i>switch-off method</i>).....	45
4.2.2 Métodos STM (<i>source term method</i>).....	45
4.2.3 Método VVM (<i>variable viscosity method</i>).....	46
4.3 MODELOS NUMÉRICOS DE MALHA FIXA UTILIZADOS EM ESTUDOS DE PCM.....	47
4.4 COMBINAÇÕES DE MODELOS DE MALHA FIXA.....	49
5 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.....	51
5.1 ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE.....	52
5.2 MÉTODOS DE INTERPOLAÇÃO.....	54
5.3 INTERPOLAÇÃO DA PRESSÃO.....	55
5.4 RESOLUÇÃO DOS GRADIENTES.....	55
5.5 CONSISTÊNCIA DOS RESULTADOS E DESEMPENHO DA SIMULAÇÃO.....	56
6 APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA.....	57
7 ABORDAGEM NUMÉRICA.....	60
7.1 MODELOS DE MUDANÇA DE FASE.....	60
7.1.1 Método Darcy STM.....	61

7.1.2 Método VVM	62
7.1.3 Método misto	63
7.2 MODELO MULTIFÁSICO	63
7.3 PROCESSO DE RESOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES	65
7.3.1 Avanço temporal	65
7.3.2 Variação dos intervalos de tempo	66
7.3.3 Verificação da convergência	66
7.4 CONTROLE DA SIMULAÇÃO	67
7.5 CONFIGURAÇÕES ANALISADAS	67
7.6 PÓS-PROCESSAMENTO	70
7.6.1 Avaliação da discretização espacial	70
7.6.2 Avaliação do desempenho das simulações	71
7.6.3 Resultados para os processos de fusão e solidificação	72
7.6.4 Resultados específicos da fusão de contato	73
8 RESULTADOS E DISCUSSÃO	78
8.1 PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO	78
8.1.1 Testes dos modelos de mudança de fase	78
8.1.1.1 Método Darcy STM	79
8.1.1.2 Método VVM.....	84
8.1.1.3 Método misto	85
8.1.1.4 Comparação dos métodos testados	86
8.1.2 Testes das configurações numéricas	88
8.1.2.1 Testes de discretização espacial.....	88
8.1.2.2 Testes de discretização temporal	89
8.1.2.3 Testes dos métodos de discretização e acoplamento pressão-velocidade.....	90
8.1.2.4 Desempenho das simulações	91
8.2 RESULTADOS PARA O PROCESSO DE FUSÃO	93
8.2.1 Testes dos modelos de mudança de fase	93
8.2.1.1 Método Darcy STM	94
8.2.1.2 Método VVM.....	99
8.2.1.3 Método misto	105
8.2.1.4 Comparação dos métodos testados	107
8.2.2 Testes das configurações numéricas	110
8.2.2.1 Verificação da modelagem da parede	110

8.2.2.2 Testes dos métodos de discretização e acoplamento pressão-velocidade.....	111
8.2.2.3 Desempenho das simulações	112
8.2.3 Análise da camada líquida no processo de fusão de contato	113
8.2.3.1 Velocidade da porção sólida.....	115
8.2.3.2 Espessura da camada líquida	116
8.2.3.3 Vazão na camada líquida	118
8.2.3.4 Influência da camada líquida nos resultados globais.....	120
8.2.3.5 Discretização espacial na camada líquida.....	123
9 CONCLUSÕES.....	126
9.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	127
REFERÊNCIAS	129
APÊNDICE A – PROGRAMAÇÃO UTILIZADA NAS UDF DE VISCOSIDADE	138
APÊNDICE B – GRÁFICOS ADICIONAIS DE FRAÇÃO LÍQUIDA E FLUXO DE CALOR PARA O PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO.....	139
APÊNDICE C – GRÁFICOS ADICIONAIS DE DESEMPENHO DAS SIMULAÇÕES.....	144
APÊNDICE D – FORMATO DO SÓLIDO E IMAGENS ADICIONAIS DO PROCESSO DE FUSÃO	147
APÊNDICE E – GRÁFICOS ADICIONAIS DE FRAÇÃO LÍQUIDA E FLUXO DE CALOR NO PROCESSO DE FUSÃO	151
APÊNDICE F – GRÁFICOS ADICIONAIS DOS RESULTADOS NA CAMADA LÍQUIDA NO PROCESSO DE FUSÃO.....	155
ANEXO A – MÉTODO DE CÁLCULO DO GCI	159

1 INTRODUÇÃO

A demanda de energia normalmente apresenta flutuações, tanto cíclicas quanto esporádicas, sendo que a principal variação cíclica é observada ao longo do dia. Portanto, todo o sistema de geração e distribuição de energia deve prever cargas do período de pico (Farid et al., 2004). Outras variações podem ser observadas em decorrência de fatores diversos, como climáticos ou variações sazonais ao longo do ano. A principal forma de atenuar picos de demanda e oscilações de fornecimento de energia é o armazenamento para posterior utilização. O armazenamento de energia é possível para diferentes aplicações e magnitudes, uma vez que pode ser utilizado em diferentes formas de energia, como: elétrica, mecânica, química e térmica (Dinçer e Rosen, 2011). Pilhas e baterias armazenam energia química, assim como capacitores armazenam energia elétrica, sendo seu uso largamente difundido em aparelhos eletrônicos e automóveis. No armazenamento de energia mecânica, lagos de usinas hidrelétricas armazenam energia potencial gravitacional em larga escala (Dinçer e Rosen, 2011), enquanto volantes de inércia armazenam energia cinética, principalmente para curtos períodos de tempo, sendo aplicados em automóveis híbridos, naves espaciais e geradores eólicos (Amiryar e Pullen, 2017). No caso da energia térmica, sua utilização abrange aplicações de climatização, conservação de alimentos, atenuação de picos de temperatura, entre outros.

A energia térmica pode ser armazenada nas formas de calor sensível ou de calor latente. No armazenamento de calor sensível, o armazenamento de energia é acompanhado por uma variação significativa na temperatura do material, enquanto no calor latente a variação de temperatura é muito pequena ou nula. Materiais de mudança de fase (PCM – *phase change materials*) são utilizados para armazenar calor latente. O estudo de PCM teve grande impulso durante a crise energética nas décadas de 1970 e 1980, principalmente para aplicação em armazenamento de energia solar térmica (Agyenim et al., 2010). No entanto, as aplicações dos PCM não se limitam a energia solar, sendo utilizados também para climatização, vestuário, aplicações médicas entre outros.

O uso de reservatórios térmicos é bastante difundido no armazenamento térmico com calor latente (Garcia e Cabeza, 2017). Estes reservatórios são preenchidos com recipientes contendo PCM, com o fluido de transferência de calor escoando entre os recipientes para armazenar ou retirar o calor para utilização. Os recipientes contendo PCM podem possuir diversos formatos, sendo os mais utilizados com seção retangular, cilindros e esferas (MacPhee e Dinçer, 2009). Uma das principais características observadas em reservatórios

térmicos com PCM é a variação da temperatura em função da posição e do tempo, uma vez que os recipientes com PCM mais próximos da entrada de fluido completam o processo de mudança de fase antes dos recipientes mais próximos da saída de fluido (Oró et al., 2013).

Recentemente, a quantidade de estudos numéricos de PCM tem aumentado significativamente (Nomura, Okinaka e Akiyama, 2010). Este aumento pode ser atribuído principalmente à maior capacidade de processamento dos computadores, aliada ao menor custo em comparação com aparatos experimentais. Diversas abordagens numéricas podem ser utilizadas para descrever processos de fusão e solidificação, conforme descrito por Poirier e Salcudean (1988), Voller, Swaminathan e Thomas (1990), Samarskii et al. (1993) Hu e Argyropoulos (1996) e Ma e Zhang (2010). Os modelos visam descrever as duas principais características físicas que estão presentes nos processos de fusão e solidificação: o calor latente e a diferença entre o escoamento do líquido e o comportamento estático do sólido. Como existem diferentes abordagens para descrever cada uma destas características físicas, é possível empregar diversas combinações em simulações numéricas de mudança de fase.

1.1 OBJETIVOS

O objetivo geral do presente trabalho é comparar, através de simulação numérica, modelos de mudança de fase aplicados aos processos de fusão e solidificação de PCM no interior de esfera parcialmente preenchida, considerando a variação no volume do material durante os processos de mudança de fase. Já os objetivos específicos são:

- investigar as características e a aplicabilidade de diferentes modelos numéricos para representação dos processos de fusão e solidificação;
- verificar as configurações dos modelos numéricos que melhor representam quantitativa e qualitativamente os processos de fusão e solidificação de PCM em cavidade esférica;
- obter um indicador do processamento necessário para executar as simulações com cada um dos modelos numéricos testados;
- analisar a camada líquida que se forma no processo de fusão com a movimentação do sólido livre.

1.2 JUSTIFICATIVA

Aplicações práticas de PCM requerem o estudo dos processos de fusão e solidificação, de modo a estender a compreensão da transferência de calor ao longo do tempo e determinar a eficiência do sistema de armazenamento térmico. Estudos numéricos são uma importante ferramenta na análise de processos de mudança de fase, tanto para complementar resultados experimentais quanto para analisar resultados nos quais a visualização ou a medição apresentam dificuldades adicionais nos experimentos.

O aumento da capacidade de processamento dos computadores ao longo do tempo permitiu o aumento na quantidade de estudos numéricos de mudança de fase. Diante deste cenário, é importante verificar, dentro dos modelos numéricos existentes, quais são os modelos mais utilizados e se existem abordagens que foram pouco exploradas.

Os processos de fusão e solidificação apresentam características físicas distintas, portanto, as configurações numéricas que melhor representam um processo podem não ser necessariamente as mais adequadas para o outro. Da mesma forma, diferentes geometrias e condições de contorno apresentam efeitos distintos nos processos de mudança de fase.

Mesmo com a maior capacidade de processamento dos computadores atuais, o uso de um indicador de custo computacional possui grande utilidade na comparação de modelos numéricos e de computadores com diferentes configurações.

No caso específico do processo de fusão com o sólido livre, é relatada na literatura a formação de uma camada líquida de pequena espessura, na qual a taxa de fusão é significativamente maior que no restante da superfície de transferência de calor. Devido à pequena espessura desta região, poucos autores se aprofundaram no estudo do escoamento e da transferência de calor na camada líquida.

1.3 TRABALHOS DO GRUPO

O presente trabalho foi realizado no Laboratório de Simulação Numérica da Universidade do Vale do Rio dos Sinos (UNISINOS), no qual o grupo de pesquisa realizou diferentes estudos envolvendo PCM. Entre as geometrias estudadas, incluem-se geometrias retangulares, cilíndricas e esféricas.

Entre os estudos que abrangem a fusão em cavidades retangulares, podem ser citados os trabalhos de Oliveski e Del Col (2014); Raymundo Júnior, Borahel e Oliveski (2015);

Borahel, Raymundo Júnior e Oliveski (2015) e de Raymundo Júnior e Oliveski (2015). O caso particular de cavidade retangular com aletas foi estudado por Silveira, Santos e Oliveski (2016) e por Silveira (2017). O processo de fusão em geometria cilíndrica vertical foi analisado por Estrázulas (2015) e por Borahel, Raymundo Júnior e Oliveski (2014).

Em relação à solidificação em geometria esférica, Borahel, Oliveski e Faistauer (2015) analisaram a influência da temperatura externa à esfera para o PCM eritritol. Este mesmo material foi utilizado no estudo de Ehms et al. (2017), no qual foram analisadas a fração líquida e o fluxo de calor durante o processo para diferentes diâmetros e condições de temperatura. Já no estudo de Ehms et al. (2018), os resultados de fração líquida para o mesmo PCM foram comparados com a correlação de Assis, Ziskind e Letan (2009), sendo obtido um ajuste da mesma para os casos analisados. No estudo de Ehms, Oliveski e Rocha (2017), foram testadas as configurações dos modelos numéricos no processo de solidificação do PCM RT27, utilizando o método da entalpia-porosidade e da viscosidade variável.

Entre os estudos do processo de fusão em esferas, Faistauer, Rodrigues e Oliveski (2017) analisaram a fração líquida ao longo do tempo para 3 diferentes PCM, com temperaturas de mudança de fase entre 35 e 82 °C, abrangendo esferas com diferentes diâmetros e temperaturas externas. O estudo de Faistauer (2016) abrange os mesmos PCM, sendo analisados o fluxo de calor e a fração líquida, incluindo a comparação com correlações existentes na literatura e uma nova correlação proposta a partir dos casos analisados. Basso (2017) analisou a influência do material do invólucro da esfera no processo de fusão do PCM RT27. Raymundo Júnior (2017) analisou a fusão de eritritol, considerando o fluxo de calor variável ao longo da superfície da esfera, com diferentes condições de escoamento externo, de acordo com dados presentes na literatura para o escoamento em torno de esferas.

1.4 ESTRUTURA DA PESQUISA

O presente trabalho está dividido em 9 capítulos. O Capítulo 2 aborda PCM, com ênfase na classificação e aplicações. No Capítulo 3 são descritos e caracterizados os processos de mudança de fase, quanto aos aspectos físicos envolvidos e à morfologia das fases em diferentes configurações geométricas. No Capítulo 4 são abordados os principais métodos de modelagem numérica de processos de mudança de fase com malha fixa e suas características. O Capítulo 5 abrange as características das principais abordagens utilizadas na fluidodinâmica computacional, assim como métodos de interpolação das variáveis e verificação dos

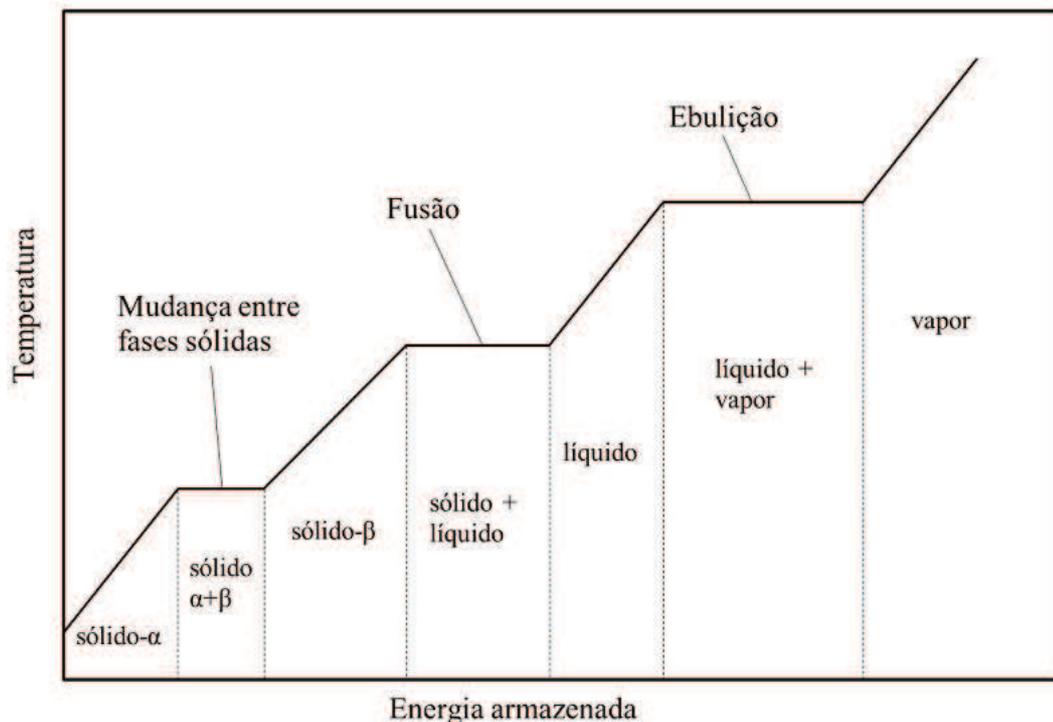
resultados. O Capítulo 6 consiste na apresentação do problema analisado, englobando as condições geométricas e de contorno. O Capítulo 7 descreve o modelo numérico utilizado no presente trabalho, os casos analisados, as configurações do software, o processo de resolução das equações e as abordagens utilizadas no pós-processamento. O Capítulo 8 consiste nos resultados obtidos, sendo dividido em duas seções principais. A primeira seção consiste nos resultados para o processo de solidificação, contando com análises individuais e comparação dos resultados obtidos com os modelos de mudança de fase, além de análises de discretização temporal e espacial, dos métodos de controle da simulação e do desempenho das simulações. Na segunda seção, são apresentados e discutidos os resultados obtidos para o processo de fusão. Inicialmente, são analisados os resultados obtidos com cada um dos modelos de mudança de fase. Em seguida, são analisados os testes das configurações numéricas e o desempenho das simulações. Por fim, são mostrados os resultados da análise da camada líquida em comparação com equações encontradas na literatura, bem como resultados relativos à transferência de calor na camada líquida e verificação da discretização espacial na camada líquida. O Capítulo 9 engloba as conclusões, considerações finais e sugestões para trabalhos futuros.

2 MATERIAIS DE MUDANÇA DE FASE – PCM

O armazenamento térmico pode ser realizado na forma de calor sensível e de calor latente. No caso do calor sensível, o armazenamento térmico é acompanhado da variação na temperatura do material, com o calor específico do material determinando a quantidade de energia necessária para variar a temperatura. Alguns exemplos de líquidos e sólidos utilizados para armazenamento de calor sensível são: água, óleo, sais fundidos, rocha e concreto (Sharma et al., 2009).

PCM são utilizados no armazenamento de calor latente, que está presente em mudanças de fase, seja entre duas fases sólidas, entre sólido e líquido (fusão e solidificação), entre líquido e vapor (ebulição e condensação) ou entre sólido e vapor (sublimação). Nas mudanças de fase é armazenada uma grande quantidade de energia em comparação com o calor sensível, porém com variação de temperatura pequena ou nula. Na Figura 2.1 é ilustrada a variação de temperatura em função da energia térmica armazenada para um material qualquer, onde é possível visualizar o aumento da temperatura na transferência de calor sensível, enquanto nas mudanças de fase o calor latente mantém a temperatura constante.

Figura 2.1 – Energia armazenada na forma de calor sensível e latente em função da temperatura



Nos processos de ebulição e condensação ocorre grande variação no volume do material (Ge et al., 2013), tornando pouco utilizáveis estes processos para armazenamento térmico devido à necessidade de reservatórios pressurizados que resultam em um sistema mais complexo e oneroso (Abhat, 1983). No entanto, reservatórios de vapor são utilizados para armazenar calor latente entre líquido e vapor em indústrias e usinas térmicas para curtos períodos (Steinmann e Eck, 2006; Medrano et al., 2010). Já nas transições entre duas fases sólidas ou entre sólido e líquido a variação no volume é consideravelmente menor (Farid et al, 2004). Desta forma, a aplicação dos processos de fusão e solidificação torna o sistema de armazenamento térmico menos complexo.

PCM sólido-sólido utilizam a transição entre duas fases sólidas, tais como transformações na microestrutura cristalina do material ou entre estruturas cristalina e amorfa (Fallahi et al., 2017). Como exemplos de PCM sólido-sólido podem ser citados compostos organometálicos, poliméricos e sais (Kenisarín e Kenisarína, 2012). Estes materiais apresentam como principal vantagem o contato direto com o fluido de transferência de calor, uma vez que o formato do sólido é mantido durante a mudança de fase (Farid et al, 2004; Fallahi et al., 2017). No entanto, o calor latente da transição entre fases sólidas é menor em comparação com a transição sólido-líquido, limitando a densidade de armazenamento térmico dos PCM sólido-sólido (Nomura, Okinaka e Akiyama, 2010).

Já no caso da mudança de fase entre sólido e líquido, as características de variação no volume e calor latente são intermediárias em relação aos demais processos de mudança de fase (sólido-sólido e líquido-vapor). Estas características proporcionam a construção de sistemas com grande capacidade de armazenamento térmico por unidade de volume, com relativa simplicidade (Abhat, 1983).

2.1 CLASSIFICAÇÃO DOS PCM

Os PCM podem ser classificados pela sua composição, tipo de processo e também temperatura de mudança de fase. Na classificação de acordo com o processo de mudança de fase, são consideradas 4 categorias: sólido-sólido, sólido-líquido, líquido-vapor e sólido-vapor (Ge et al., 2013). No entanto, a grande maioria dos PCM se enquadra na categoria de transição sólido-líquido.

O principal parâmetro na escolha de um PCM para uma determinada aplicação é a temperatura de mudança de fase, que deve ser compatível com as temperaturas que ocorrem

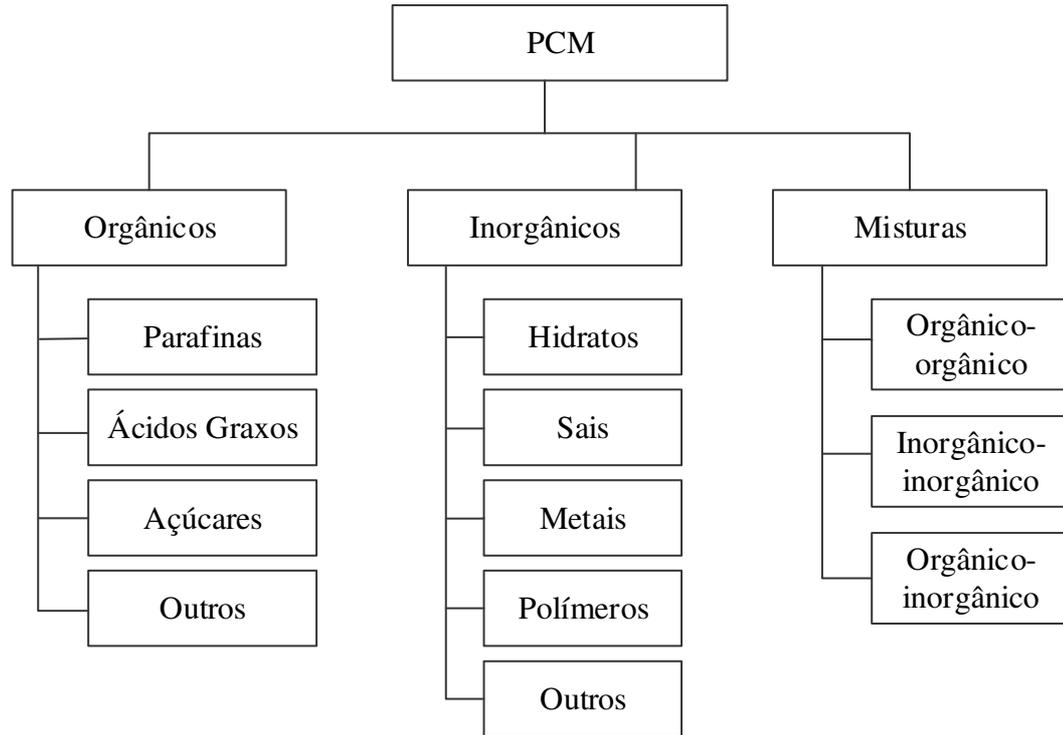
nesta aplicação. Atualmente, encontram-se disponíveis comercialmente PCM em uma ampla gama de temperaturas de mudança de fase, desde -100 até acima de 800 °C (PCM Products, 2017). No entanto, a gama de temperaturas pode ser estendida, uma vez que materiais com temperatura de mudança de fase até 1400 °C são potencialmente utilizáveis como PCM (Nomura, Okinaka e Akiyama, 2010). Quanto à classificação segundo a temperatura de mudança de fase, é aceita na literatura a divisão entre alta, média e baixa. Porém, os valores que definem as categorias diferem consideravelmente, de autor para autor, conforme pode ser observado na Tabela 2.1.

Tabela 2.1 – Classificação dos PCM de acordo com a temperatura de mudança de fase

Referência	Baixa temperatura	Média temperatura	Alta temperatura
Abhat (1983)	<120 °C	-	-
Zalba et al. (2003)	<100 °C	-	-
Agyenim et al. (2010)	<60 °C	80 a 120 °C	>150 °C
Gil et al. (2010)	-	-	>120 °C
Nomura, Okinaka e Akiyama (2010)	-	-	>100 °C
Ge et al. (2013)	<30 °C	40 a 200 °C	>200 °C

Na classificação dos PCM em função da composição, Abhat (1983) divide em dois grupos principais: orgânicos e inorgânicos. Zalba et al. (2003) cita como principais tipos de PCM orgânicos as parafinas e ácidos graxos. Sharma et al. (2009) inclui a categoria de misturas de componentes das demais categorias e divide os inorgânicos entre hidratos de sais e metais. Nomura, Okinaka e Akiyama (2010) inclui nos inorgânicos o subgrupo de sais fundidos. Kenisarin (2010) subdivide os sais de acordo com a composição. Ainda são citados materiais de composições diferentes por Zalba et al. (2003) e por Nomura, Okinaka e Akiyama (2010), como polímeros no caso dos inorgânicos e açúcares no caso dos orgânicos. Combinando as categorias apresentadas é possível classificar os PCM quanto à composição na Figura 2.2.

Figura 2.2 – Classificação dos PCM conforme sua composição



Os materiais pertencentes a cada um dos grupos de PCM possuem características semelhantes. Dentre os orgânicos, as principais características das parafinas e ácidos graxos são a estabilidade química e a baixa corrosividade, porém com baixa condutividade térmica, inflamabilidade e baixo calor latente (Zalba et al., 2003). Quanto à temperatura de mudança de fase, a maior parte das parafinas e ácidos graxos encontra-se na gama de baixa temperatura (Sharma et al., 2009). O grupo dos açúcares difere dos demais orgânicos principalmente pela presença de materiais com temperatura de mudança de fase acima de 100 °C (Nomura, Okinaka e Akiyama, 2010) e pelo maior calor latente.

No caso dos PCM inorgânicos, os hidratos e sais apresentam maior condutividade térmica e maior capacidade de armazenamento térmico em relação ao volume quando comparados às parafinas (Farid et al., 2004), além de menor variação no volume durante a mudança de fase (Sharma et al., 2009). Como principais desvantagens dos sais e hidratos podem ser citadas a corrosividade (Zalba et al., 2003) e a segregação de fases nos hidratos, que ocorre devido à solubilidade dos sais em água, formando componentes com massas específicas diferentes que se separam durante a mudança de fase (Sharma et al., 2009). Os metais possuem alta condutividade térmica e baixo calor latente em comparação com os demais PCM. Entretanto, a capacidade de armazenamento térmico dos metais é alta em relação ao volume devido à elevada massa específica (Sharma et al., 2009). Quanto à

temperatura de mudança de fase, os sais e os metais abrangem uma ampla gama, principalmente para aplicações de alta temperatura (Nomura, Okinaka e Akiyama, 2010).

2.2 APLICAÇÕES DE PCM

Dentre os estudos de PCM existentes na literatura, as aplicações mais abordadas são em energia solar e sistemas de climatização (Zalba et al., 2003). A utilização de água como PCM pode ser vantajosa para sistemas de ar condicionado como forma de reduzir o consumo em períodos de pico. Nos sistemas de ar condicionado comuns, sem armazenamento térmico, o consumo máximo ocorre durante o dia, quando o custo da energia elétrica é mais alto em diversas regiões. Em sistemas com armazenamento, durante a noite o sistema é utilizado para produzir gelo, que é fundido durante o dia nos horários de pico para utilização no sistema de ar condicionado. Além da vantagem de menor consumo de energia no horário de pico, as menores temperaturas que ocorrem durante a noite proporcionam um leve aumento na eficiência dos equipamentos de refrigeração (Dinçer e Rosen, 2011). É importante salientar que, além da água, outros PCM também são utilizados para esta aplicação.

Na climatização passiva, são disponíveis comercialmente placas de isolamento térmico impregnadas com cápsulas de PCM. A instalação destas placas proporciona uma atenuação dos picos de temperatura no interior da edificação, reduzindo a temperatura máxima durante o dia e aumentando a temperatura mínima durante a noite. Desta forma, é reduzida também a carga térmica e, conseqüentemente, a intensidade do uso de sistemas de ar condicionado e calefação (Sharma et al., 2009). Dentre aplicações residenciais, pode ser citado também o armazenamento térmico em sistemas de aquecimento solar para água de consumo (Abhat, 1983). Normalmente, estes sistemas utilizam água para armazenar calor sensível, devido ao baixo custo de instalação. O uso de PCM para armazenamento de calor latente em sistemas de aquecimento solar possui como principais vantagens a redução do tamanho do reservatório e o aumento da eficiência do sistema (Sharif et al., 2015). No entanto, o custo do PCM ainda pode ser um obstáculo ao emprego de PCM em larga escala em sistemas de aquecimento de água domésticos (Zalba et al., 2003).

Naves espaciais e satélites operam em ciclos periódicos a cada período orbital, com a temperatura variando entre um valor máximo quando a nave é exposta diretamente à radiação solar até um mínimo quando a mesma passa através da sombra projetada pela Terra. Desta

forma, o uso de PCM atenua os picos de temperatura, representando menor consumo energético para manter a temperatura interna (Hale, Hoover e O'Neill, 1971).

Em plantas heliotérmicas são utilizados PCM de alta temperatura para armazenamento térmico. Nestes sistemas, parte da energia solar coletada ao longo do dia é direcionada para um reservatório com PCM. Durante períodos sem incidência solar, a energia acumulada no PCM é utilizada para manter a planta em operação (Gil et al, 2010). O desempenho do armazenamento térmico e da planta em geral é melhorado com o uso de sistema de armazenamento em cascata, composto por mais de um PCM com diferentes temperaturas de mudança de fase (Michels e Pitz-Paal, 2007; Gong e Mujumdar, 1997). Sistemas em cascata são configurados com as temperaturas de mudança de fase dos PCM em sequência. Desta forma, durante a carga, o fluido de trabalho passa pelos PCM a partir da maior temperatura de mudança de fase, enquanto o escoamento é invertido durante a descarga (Xu et al., 2016)

O armazenamento de calor residual de processos industriais utilizando PCM apresenta grande potencial de economia de recursos energéticos (Nomura, Okinaka e Akiyama, 2010), como no caso de siderúrgicas, onde é rejeitada grande quantidade de calor no resfriamento das ligas metálicas produzidas (Saro et al., 2013). Devido à grande quantidade de calor rejeitado nestas indústrias, o conceito apresentado por Yagi e Akiyama (1995) considera o armazenamento do calor residual em PCM encapsulado e posterior armazenamento em centro de distribuição para uso em aquecimento distrital. O calor residual também pode ser aproveitado através de PCM em veículos automotores e máquinas hidráulicas, onde o calor residual do motor pode ser armazenado para pré-aquecimento do mesmo em partidas a frio, uma vez que os maiores índices de desgaste ocorrem nesta etapa (Zalba et al., 2003).

Em veículos automotores, também vem sendo estudado o uso de PCM para controle térmico de baterias, principalmente em veículos híbridos e elétricos. Temperaturas excessivamente baixas ou altas podem influenciar no desempenho das baterias, reduzindo a autonomia do veículo. Em casos críticos, o superaquecimento da bateria pode causar danos ou até mesmo falha total do componente, levando ao comprometimento da segurança (Jaguemont et al., 2018). O uso de PCM para prevenção de falhas graves em baterias também é considerado em equipamentos eletrônicos, com vários estudos objetivando a utilização de PCM para aumentar a capacidade de dissipação térmica nestes equipamentos (Sahoo et al., 2016).

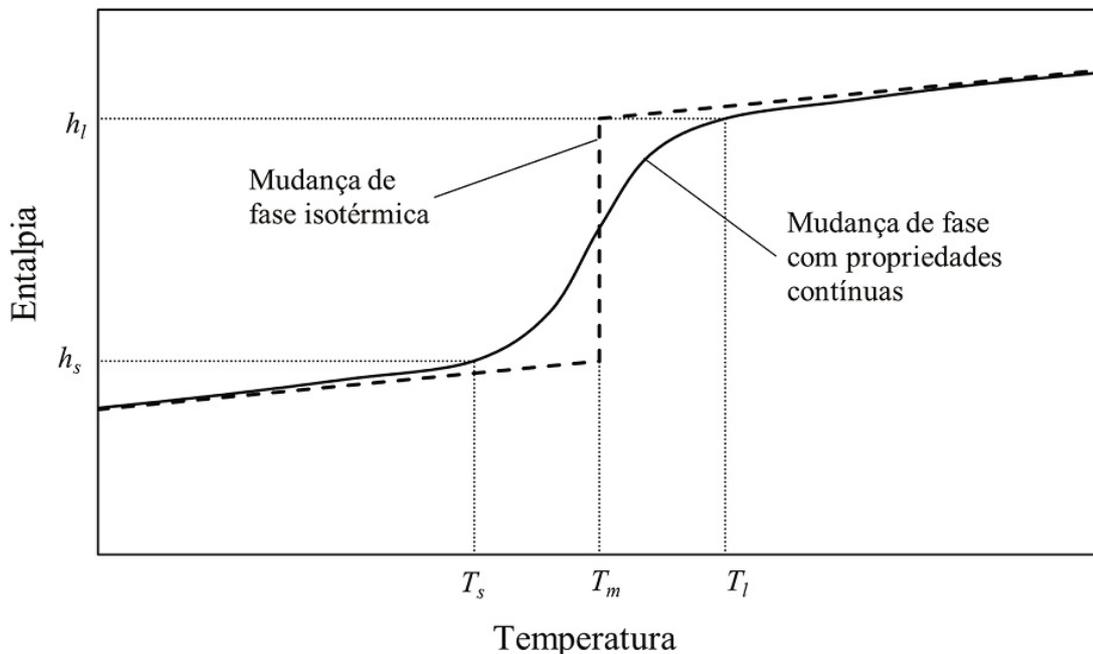
Em produtos têxteis, microcápsulas com PCM são incorporadas em tecidos, visando conforto térmico em alta ou baixa temperatura. Estes tecidos são empregados em itens de vestuário, trajes espaciais, itens esportivos, calçados e acessórios (Mondal, 2008). O

armazenamento térmico com PCM resulta em aumento de desempenho em secadores solares para produtos agrícolas e alimentos (Shalaby et al., 2014). Outros exemplos de aplicações de PCM são: transporte de alimentos e medicamentos, aplicações médicas como terapias com temperaturas altas ou baixas, conservação de alimentos e controle de temperatura no transporte de mercadorias (Zalba et al., 2003).

3 PROCESSOS DE MUDANÇA DE FASE

Processos físicos de mudança de fase podem ocorrer em uma única temperatura (processo de mudança de fase isotérmico) ou em um intervalo de temperatura (processo de mudança de fase com propriedades contínuas; Egolf e Manz, 1994). Os últimos são assim chamados por apresentarem variação de suas propriedades de forma contínua com a temperatura. De modo a exemplificar a diferença entre os dois processos de mudança de fase, a Figura 3.1, ilustra a variação da entalpia (h) nos processos de mudança de fase isotérmica e com propriedades contínuas. No caso de mudança de fase isotérmica, representada em linha tracejada, a entalpia de mudança de fase é representada como uma linha vertical na temperatura de mudança de fase (T_m). Já a mudança de fase contínua, representada em linha contínua, apresenta um intervalo de temperatura de mudança de fase delimitado pelas temperaturas T_s e T_l , onde T_s representa a temperatura *solidus*, abaixo da qual o material é completamente sólido, enquanto T_l representa a temperatura *liquidus*, acima da qual o material é completamente líquido (Cleaves II, 2015).

Figura 3.1 – Variação da entalpia nos processos de mudança de fase isotérmica e com propriedades contínuas.



Fonte: Adaptado de Egolf e Manz (1994)

Nos processos de mudança de fase com propriedades contínuas, a interface entre o sólido e o líquido, também chamada de *mushy zone*, possui uma espessura finita e diferente de zero (Egolf e Manz, 1994). Esta espessura é diretamente proporcional ao tamanho do intervalo de temperatura no qual a mudança de fase ocorre, tendendo a zero conforme este intervalo se aproxima de zero, como é verificado na mudança de fase isotérmica. As fases sólida e líquida coexistem na região de interface, com maior proporção de sólido em temperaturas próximas de T_s e maior proporção de líquido à medida que a temperatura se aproxima de T_l . O processo de mudança de fase isotérmico ocorre principalmente em substâncias puras e misturas eutéticas (Shamsundar e Sparrow, 1976). Ligas metálicas (Voller e Prakash, 1987), misturas e substâncias amorfas (Egolf e Manz, 1994) são exemplos de materiais com mudança de fase com propriedades contínuas.

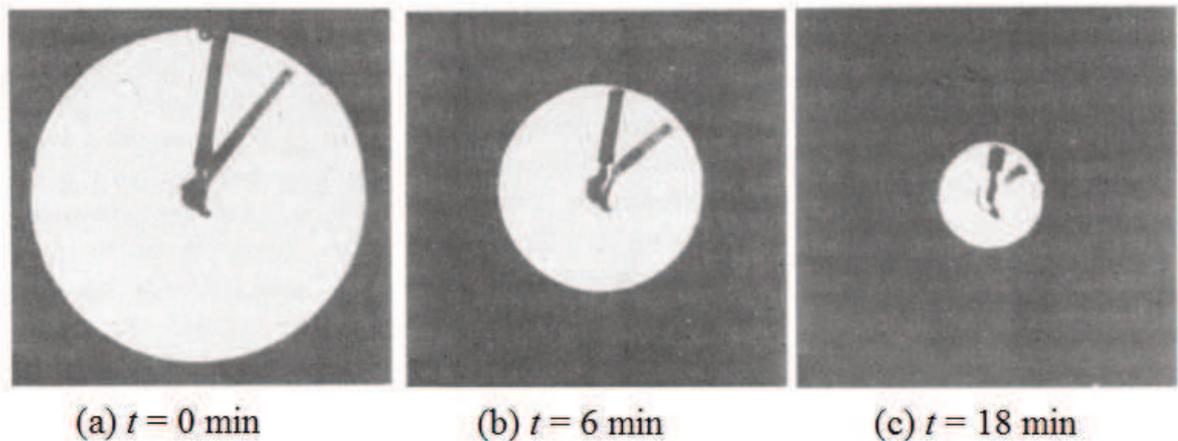
3.1 PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO

No processo de solidificação a transferência de calor é predominantemente condutiva, como observado por Gau e Viskanta (1986) e por Assis, Ziskind e Letan (2009). No entanto, os efeitos promovidos pela convecção podem ser observados em alguns casos, como mostrado por Gau e Viskanta (1986) em cavidade retangular com transferência de calor na superfície lateral, onde a convecção afeta o formato do sólido principalmente após os instantes iniciais.

A principal característica observada no processo de solidificação é a formação de uma camada sólida que incrementa sua espessura progressivamente a partir da superfície de transferência de calor (Ismail et al., 2014). Desta forma, a taxa de solidificação é reduzida ao longo do processo, sendo este efeito observado através da maior variação na fração líquida nos instantes iniciais. Para exemplificar, na Figura 3.2 são mostrados resultados obtidos experimentalmente por Viskanta e Gau (1982) para a solidificação de água no interior de um tubo horizontal com diâmetro interno de 31,8 mm, em três instantes de tempo (t): (a) inicial, (b) 6 min e (c) 18 min. Nas imagens, a porção sólida é mostrada em cor escura, assim como o anteparo em torno do tubo utilizado para aumentar o contraste das imagens. Desta forma, é possível identificar o padrão simétrico de solidificação das bordas em direção ao centro das imagens. A redução na taxa de solidificação é notada através da maior diferença na quantidade de PCM líquido entre as imagens (a) e (b) em um menor intervalo de tempo em comparação com o intervalo transcorrido entre as imagens (b) e (c). Vale ressaltar que as

porções escuras que partem do centro das imagens são o conjunto de termopares e um tubo para expansão do fluido.

Figura 3.2 – Solidificação de água no interior de tubo horizontal analisado por Viskanta e Gau (1982) nos instantes: (a) inicial, (b) $t = 6$ min e (c) $t = 18$ min.



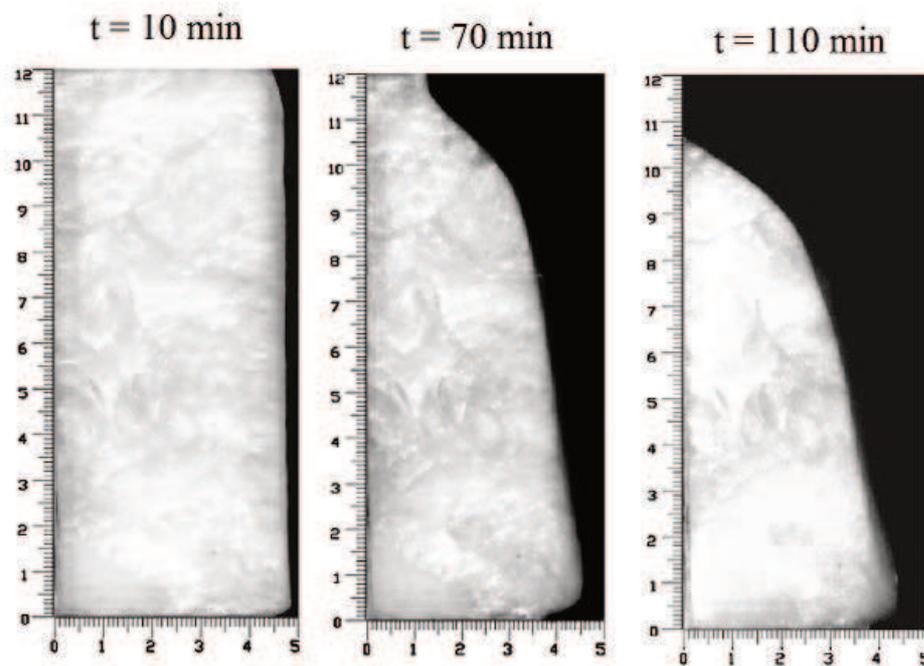
Resultados presentes na literatura mostram que a redução na taxa de solidificação ocorre em todas as geometrias, uma vez que é identificada nos resultados em diferentes configurações, como tubos verticais (Dubovsky et al., 2009); tubos horizontais concêntricos com e sem aletas (Al-Abidi et al, 2013) e esferas (Assis, Ziskind e Letan, 2009; Chan e Tan, 2006). No entanto, poucos estudos experimentais mostram imagens nítidas do formato do sólido ao longo do tempo, uma vez que grande parte dos PCM são transparentes ou translúcidos apenas na fase líquida. Além deste motivo, são relatadas dificuldades na obtenção de imagens no estudo de Viskanta e Gau (1982) devido à solidificação de parte do material na superfície transparente utilizada para visualização.

3.2 PROCESSO DE FUSÃO

O início do processo de fusão é caracterizado pela transferência de calor por condução (Tan, 2008). No entanto, a maior parte do processo de fusão é influenciado pelo processo de transferência de calor por convecção (Pal e Joshi, 2001). Esta influência pode ser observada na morfologia da fase sólida. Por exemplo, no caso de cavidades retangulares com transferência de calor somente pela superfície lateral, a fase líquida junto a parede aquecida ascende a cavidade, em função do empuxo provocado pela variação da temperatura e

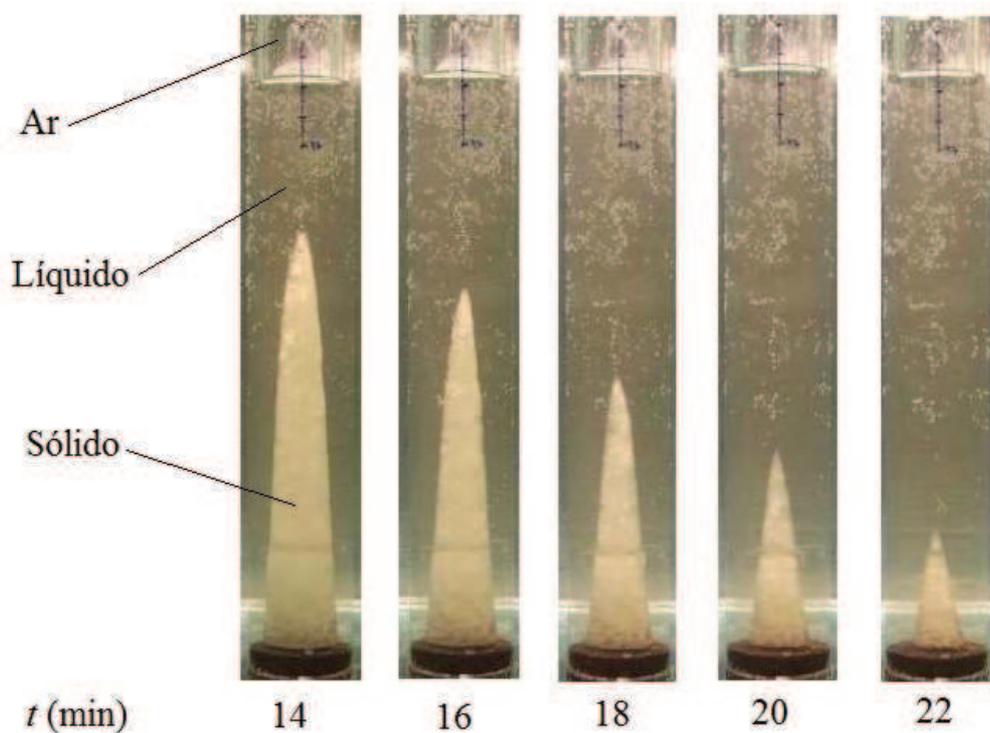
consequente redução da massa específica. Estas correntes convectivas aquecidas pela parede quente provocam maior taxa de fusão na região superior. O sólido remanescente toma um formato afunilado na região superior, que se torna mais evidente ao longo do tempo. Na Figura 3.3 são mostrados os formatos do sólido no estudo experimental de Shokouhmand e Kamkari (2013) em diferentes instantes. Comparando-se estas figuras, fica evidente o formato afunilado na região superior do sólido, que é mostrado em cor clara.

Figura 3.3 – Exemplo de processo de fusão em cavidades retangulares com aquecimento na superfície lateral (Shokouhmand e Kamkari, 2013).



Para o caso de cilindros verticais com aquecimento pela superfície lateral e base adiabática, o sólido assume formato semelhante ao do caso da cavidade retangular com transferência de calor na superfície lateral. Em função da simetria em torno do eixo central do cilindro, o sólido assume formato cônico nesta geometria. Na Figura 3.4 é mostrado o formato do sólido no estudo experimental de Katsman et al. (2007) em diferentes etapas do processo de fusão de PCM com a presença de ar na região superior.

Figura 3.4 – Processo de fusão em cilindro vertical (Katsman et al., 2007) para $t = 14, 16, 18, 20$ e 22 min.



Os processos de fusão com as configurações mostradas anteriormente, com aquecimento em superfície lateral, possuem em comum a posição fixa do sólido. Como a superfície inferior é adiabática, o sólido se mantém apoiado sobre a mesma. No entanto, grande parte dos recipientes com PCM podem apresentar transferência de calor a partir da superfície inferior. Os casos mais evidentes desta característica são cilindros horizontais e esferas, nos quais toda a superfície transfere calor. Além destes exemplos, cavidades retangulares e cilindros verticais também podem transferir calor em sua superfície inferior.

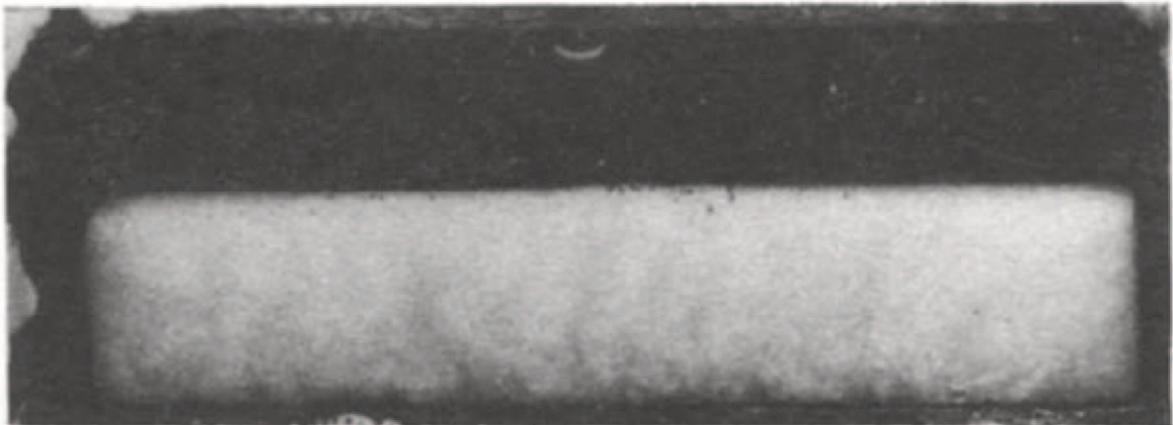
Em qualquer processo que ocorra variação de massa específica, as parcelas de menor ordem tendem a permanecer sobre as demais. No caso dos PCM, a massa específica da fase sólida é maior do que a da fase líquida. Assim, em processos com aquecimento da superfície inferior da fase sólida com consequente mudança de fase, a parcela líquida ascenderá a cavidade e a parcela sólida permanecerá próxima da superfície inferior aquecida. O inverso ocorre em materiais que possuem massa específica maior na fase líquida, como a água.

Os processos de fusão onde o material sólido se move em direção à superfície aquecida ou vice-versa, são conhecidos como fusão de contato (*close contact melting*; Moallemi, Webb e Viskanta, 1986) ou fusão sem restrição do sólido (*unconstrained melting*; Tan, 2008). Este processo é caracterizado pela formação de uma camada líquida entre o

material sólido e a superfície aquecida. À medida que o material funde, o líquido formado no processo desloca-se para fora da área de contato entre o sólido e a superfície aquecida (Bareiss e Beer, 1984).

No processo de fusão de contato, a espessura da camada líquida abaixo do sólido é muito pequena em comparação com as dimensões da cavidade (Moallemi, Webb e Viskanta, 1986). Na Figura 3.5 é mostrado o formato do sólido em cavidade retangular durante o processo de fusão de contato no estudo de Hirata, Makino e Kaneko (1991), onde é possível observar que o sólido, em cor clara, se mantém na região inferior da cavidade, assim como seu formato se mantém semelhante ao da cavidade. Ao comparar o formato do sólido com os casos com aquecimento somente na superfície lateral, mostrados na Figura 3.3, fica evidente que a configuração térmica das superfícies da cavidade influencia fortemente o formato do sólido ao longo do processo.

Figura 3.5 – Formato do sólido na fusão de contato mostrado no estudo de Hirata, Makino e Kaneko (1991).

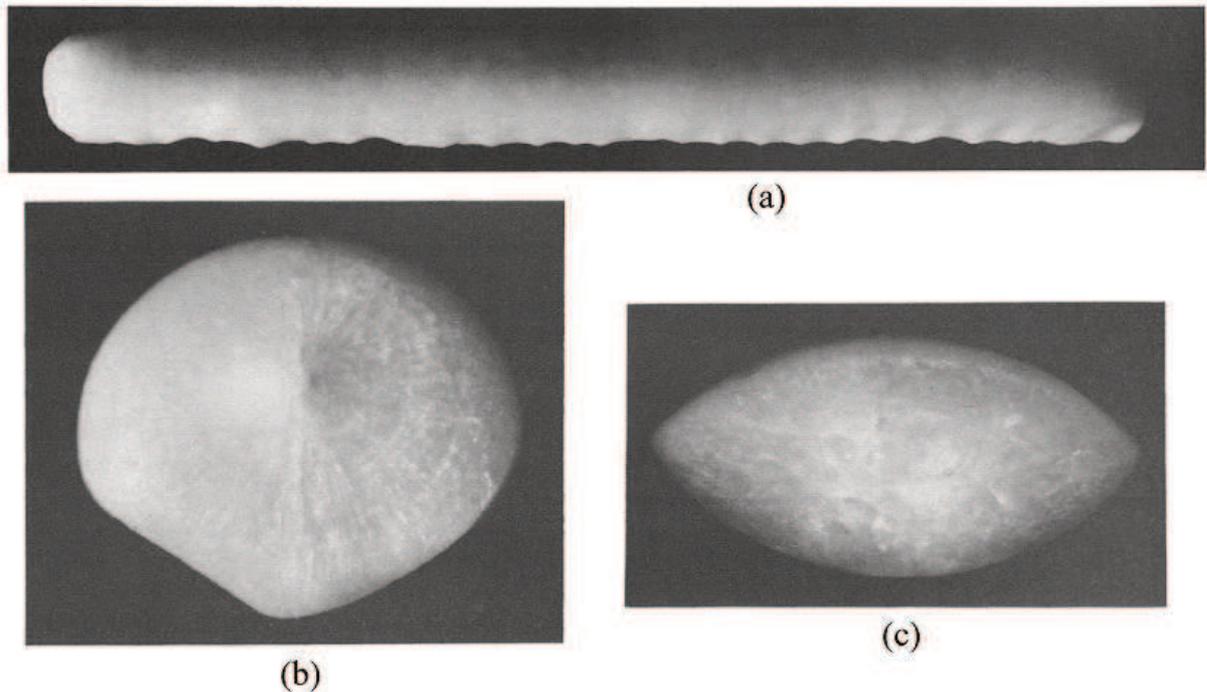


Para casos de cilindros horizontais e esferas, são observadas semelhanças na morfologia das fases, tanto para o sólido fixo quanto para fusão de contato. No entanto, outros resultados, como taxa de fusão, fluxo de calor ou tempo total de mudança de fase apresentam diferenças em função das características geométricas. Nas situações em que o sólido é fixo, o processo de fusão inicia de forma simétrica a partir da superfície aquecida, porém ao longo do tempo, formam-se ondulações na região inferior do sólido em função dos movimentos convectivos do líquido (Tan, 2008). Por outro lado, na fusão de contato, o formato do sólido mantém um maior grau de simetria ao longo do processo.

A Figura 3.6 mostra o formato do sólido no processo de fusão em cilindro horizontal analisado por Sparrow e Geiger (1986). No caso de sólido fixo, são observadas ondulações na

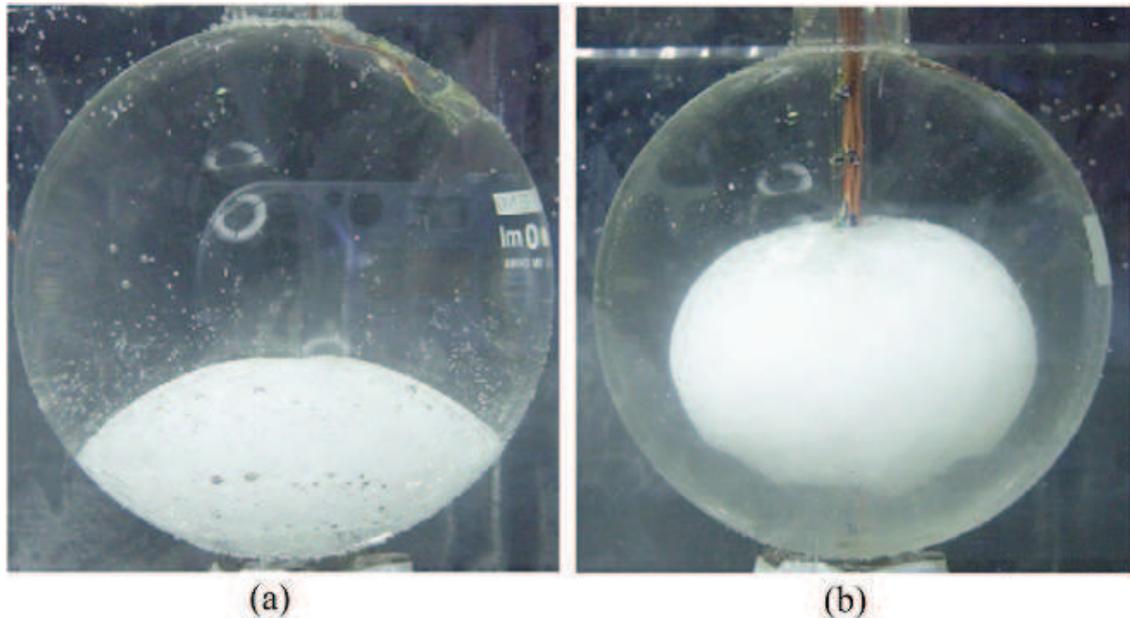
região inferior, tanto na seção longitudinal (Figura 3.6 (a)) quanto na seção transversal (Figura 3.6 (b)). Estas ondulações não são observadas na fusão de contato (Figura 3.6 (c)), uma vez que a porção inferior se mantém próxima da superfície aquecida e assume formato semelhante ao da superfície.

Figura 3.6 – Fusão de PCM em cilindro horizontal analisado por Sparrow e Geiger (1986): (a) vista longitudinal para o caso com sólido fixo, (b) vista transversal para o caso com sólido fixo e (c) vista transversal para o caso com sólido livre.



No caso do processo de fusão em esferas, são observadas semelhanças no formato do sólido em comparação com a seção transversal de cilindros horizontais. A Figura 3.7 mostra o formato do sólido nos casos analisados por Tan (2008). O formato assumido pelo sólido é semelhante ao caso do cilindro horizontal, tanto para o sólido livre, mostrado na Figura 3.7(a), quanto para o sólido fixo, mostrado na Figura 3.7(b). Em situações com as mesmas condições de temperatura, foi observada maior taxa de fusão no caso do sólido livre, implicando em um tempo menor para completar a fusão do material.

Figura 3.7 – Fusão de PCM em esfera analisada por Tan (2008): (a) sólido livre e (b) sólido fixo.

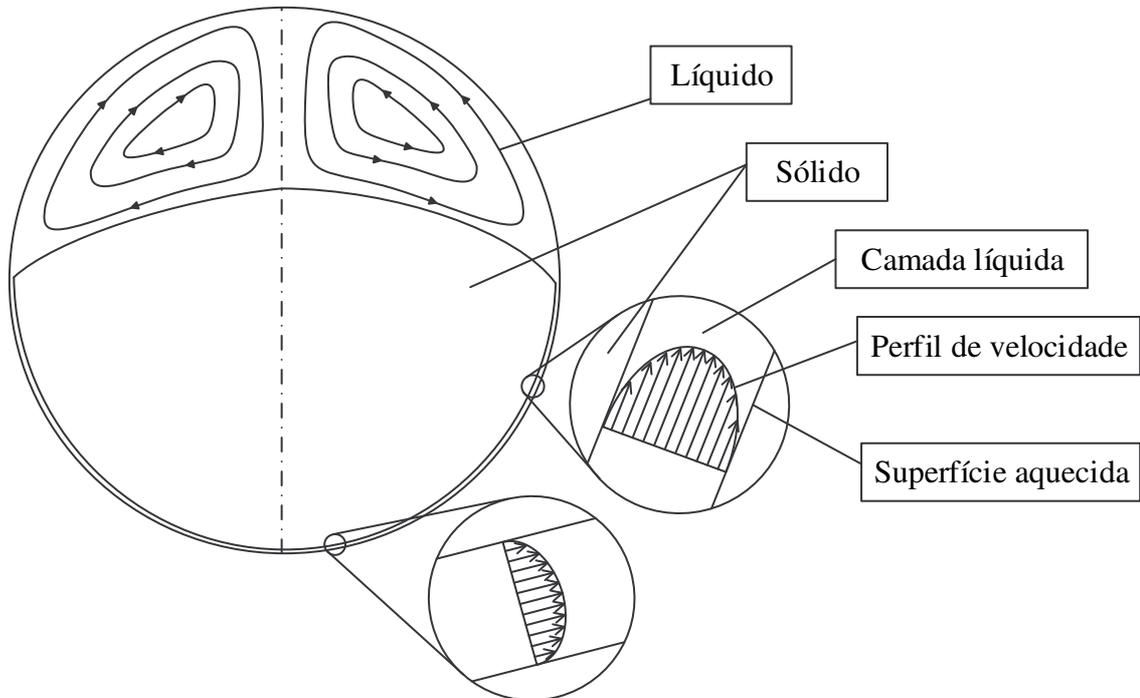


Durante a fusão de contato, a massa sólida se movimenta em direção à superfície aquecida devido às forças de empuxo, mantendo a espessura da camada líquida estável. Este processo de deslocamento do sólido promove um escoamento praticamente constante na camada líquida, e conseqüentemente, uma taxa de fusão praticamente constante e maior em comparação com os casos nos quais o sólido é fixo (Moallemi, Webb e Viskanta, 1986). Ao final do processo é observado um aumento da espessura da camada líquida, sendo este aumento atribuído à redução das forças de corpo do sólido, uma vez que sua massa se reduz ao longo do tempo (Hirata, Makino e Kaneko, 1991). A visualização da camada de líquido formada entre o sólido e a superfície aquecida no processo de fusão de contato é dificultada ou até impossibilitada devido à sua pequena espessura (Bareiss e Beer, 1984).

No processo de fusão de PCM em esferas completamente preenchidas, a formação da camada líquida é responsável pela maior parte da fusão do material. Porém, entre 10 e 15 % do material é fundido através de correntes convectivas na porção superior, principalmente em cilindros horizontais (Bahrami e Wang, 1987; Saitoh e Kato, 1993). Além da formação da camada líquida na região inferior, ocorrem movimentos convectivos na região superior, acima do sólido, conforme ilustrado na Figura 3.8, onde é mostrada também a camada líquida abaixo do sólido. O escoamento na camada líquida aumenta a partir do eixo central, uma vez que a quantidade de massa líquida é incrementada progressivamente ao longo do seu deslocamento em direção à região superior. O perfil de velocidade na camada líquida varia ao longo da

posição, porém apresenta pouca variação ao longo do tempo (Fomin e Saitoh, 1999). Além do perfil de velocidade, a espessura da camada líquida aumenta a partir do eixo de simetria, em direção à região superior (Emerman e Turcotte, 1983).

Figura 3.8 – Escoamento do líquido na fusão de contato em esfera



Fonte: adaptado de Fomin e Saitoh (1999).

São encontradas na literatura equações e correlações que descrevem diferentes parâmetros na fusão de contato em esferas, tais como para determinar: a espessura da camada líquida (Emerman e Turcotte, 1982; Fomin e Saitoh, 1999); a taxa de fusão na camada líquida (Bahrami e Wang, 1987; Bejan, 1992) ou movimento descendente da porção sólida (Moallemi, Webb e Viskanta, 1986; Roy e Sengupta, 1990). No entanto, não foram encontrados estudos numéricos que analisam diretamente a camada líquida, dada a sua pequena espessura, que dificulta a observação direta e a utilização de instrumentos de medição. Em relação a estudos numéricos, alguns autores obtiveram resultados de espessura da camada líquida (Asako e Faghri, 1999; Faden et al., 2018) e da velocidade descendente do sólido (Ghasemi e Molki, 1999; Kasibhatla et al., 2017).

4 MODELOS NUMÉRICOS PARA PROCESSOS DE MUDANÇA DE FASE

A modelagem matemática de processos de mudança de fase isotérmicos é também conhecida como problema de fronteira móvel ou modelo de Stefan, uma vez que o estudo apresentado por Stefan (1891) foi um dos pioneiros nesta área. Este modelo foi elaborado com a finalidade de analisar a taxa de formação de gelo sobre massas de água nas regiões polares, considerando somente a condução de calor de forma unidimensional e analisando somente a região que se encontra na fase sólida. Desta forma, com a massa de água inicialmente na fase líquida é utilizada uma determinada temperatura como condição de contorno na superfície, iniciando o processo de solidificação a partir desta superfície em direção ao seu interior. A interface entre o sólido e o líquido é considerada como uma fronteira móvel, com temperatura T_m , que se desloca de modo a aumentar progressivamente a espessura do sólido.

No caso de mudança de fase com propriedades contínuas, não é observada uma interface bem definida entre o sólido e o líquido, com ambas as fases coexistindo na região de interface (Bennon e Incropera, 1987). Portanto, a região de transição não pode ser descrita numericamente como uma fronteira com condições de contorno definidas. Desta forma, modelos numéricos são a solução mais utilizada para o caso de mudança de fase com propriedades contínuas. Por outro lado, para os processos isotérmicos, a descontinuidade de propriedades representa um fator dificultante a ser contornado no caso de utilização de modelos numéricos (Egolf e Manz, 1994).

Diferentes modelos numéricos de mudança de fase são encontrados na literatura, sendo divididos em dois grupos principais: malha fixa e malha deformável (Bennon e Incropera, 1987). Além destes grupos, alguns modelos podem ser considerados como intermediários entre os de malha fixa e os de malha deformável, nos quais a malha é fixa, porém, a interface entre o sólido e o líquido é rastreada e reconstruída. Um exemplo destes modelos é o apresentado por Kozak e Ziskind (2017), no qual o sólido é modelado como um bloco único dentro do qual a velocidade assume uma única direção e magnitude, sendo esta velocidade calculada através de balanço de forças.

Os modelos de malha deformável ou bifásicos baseiam-se no uso de domínios computacionais distintos para o sólido e para o líquido, tendo, portanto, equações distintas para cada um dos domínios, que são acopladas através de termos de transferência entre as fases (Voller, Brent e Prakash, 1989). Estes modelos são mais adequados para processos de mudança de fase isotérmicos, por possibilitar a definição de uma interface cuja espessura tende à zero (Bennon e Incropera, 1987). Além da maior quantidade de equações, são

necessários métodos de rastreamento da interface e ajuste da malha de acordo com esta interface, refletindo em maior complexidade na resolução do problema. Nestes modelos, o ajuste segundo a interface entre as fases pode ser feito através da variação dos pontos na malha computacional (malha dinâmica), ou da variação dos intervalos de tempo de acordo com a posição da interface (ajuste da interface). Estas variações são realizadas com o objetivo de coincidir a posição da interface sobre os pontos da malha computacional (Hu e Argyropoulos, 1996).

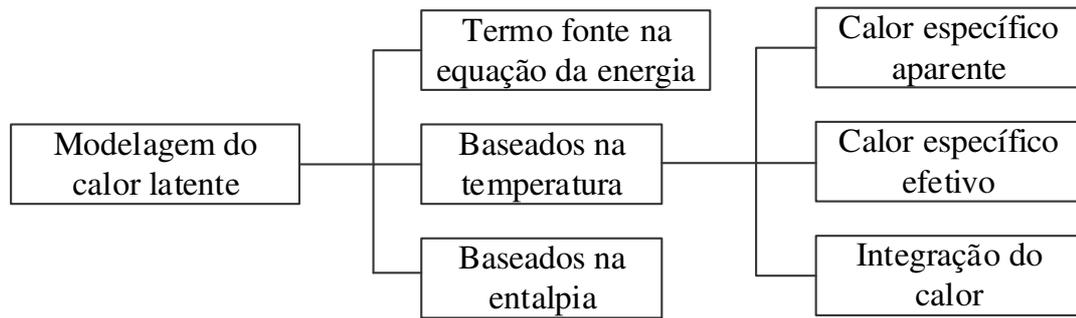
Os modelos de malha fixa, ou contínuos, utilizam um único domínio computacional, tornando sua implementação mais simples, ainda com resultados satisfatórios (Ma e Zhang, 2006). Como nestes modelos não há o rastreamento da interface entre as fases, sua utilização torna-se bastante vantajosa para processos de mudança de fase com propriedades contínuas, que não apresentam uma interface definida entre sólido e líquido (Bennon e Incropera, 1987). Devido a estes fatores, modelos contínuos são encontrados na literatura em maior quantidade.

Nos modelos contínuos (malha fixa), as equações da continuidade, da conservação da energia e da quantidade de movimento são aplicadas a todo o domínio. Desta forma, não são necessárias condições de contorno específicas entre as fases ou conjuntos de equações em separado. No entanto, são introduzidas modificações específicas nas equações do domínio único para descrever os processos de mudança de fase. As modificações introduzidas normalmente são utilizadas para modelar o calor latente e a transição de velocidade entre as fases líquida e sólida. Características específicas destes modelos são apresentadas na sequência.

4.1 MODELAGEM DO CALOR LATENTE

O calor latente é modelado através de modificações na equação da conservação da energia, de forma a descrever a variação na entalpia presente na mudança de fase. Os métodos de modelagem do calor latente são classificados de acordo com a natureza da modificação introduzida na equação: (a) baseados em entalpia, (b) baseados em temperatura e (c) através de termo fonte (Ma e Zhang, 2006). Métodos baseados em temperatura ainda são subdivididos em: calor específico aparente, calor específico efetivo e integração do calor (Hu e Argyropoulos, 1996). A classificação dos modelos de calor latente é mostrada de forma sintetizada na Figura 4.1 e suas especificações são descritas na sequência.

Figura 4.1 – Classificação dos modelos de calor latente.



4.1.1 Métodos baseados na temperatura

Nos modelos baseados na temperatura, como o de Morgan (1981), a equação da conservação da energia assume o formato mostrado na Eq. (4.1).

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (4.1)$$

onde ρ é a massa específica, C_p é o calor específico, T é a temperatura, t é o tempo, \vec{V} é o vetor velocidade e k é a condutividade térmica. O calor latente é modelado através de um aumento do calor específico dentro do intervalo de temperatura de mudança de fase. Métodos baseados na temperatura apresentam estabilidade na convergência para processos de mudança de fase com propriedades contínuas, porém a convergência é dificultada com a redução do intervalo de mudança de fase (Ma e Zhang, 2006).

No método de calor específico aparente, o calor específico é definido conforme mostrado na Eq. (4.3) (Hu e Argyropoulos, 1996).

$$C_p = C_{ap} = \left\{ \begin{array}{ll} C_{p,s} & se \quad T < T_s \\ \frac{\int_{T_s}^{T_l} C_p dT + L}{(T_l - T_s)} & se \quad T_s < T < T_l \\ C_{p,l} & se \quad T > T_l \end{array} \right\} \quad (4.2)$$

onde C_{ap} é o calor específico aparente e os índices s e l se referem ao sólido e ao líquido, respectivamente. Um dos principais problemas enfrentados no método de calor específico

aparente surge quando ocorrem variações significativas de temperatura ao longo de um intervalo de tempo (dt) nos volumes de controle que estejam em temperaturas próximas da mudança de fase. Nestas situações, o calor latente pode não ser computado caso a variação de temperatura seja maior que o intervalo de mudança de fase. Para evitar este problema, é necessário utilizar dt pequenos, implicando em maior tempo de simulação (Hu e Argyropoulos, 1996).

O método de calor específico efetivo se baseia no calor específico aparente, de modo a facilitar a convergência (Poirier e Salcudean, 1988). Neste método, é definido um perfil de temperatura nos volumes de controle. O calor específico é substituído pelo calor específico efetivo (C_{ef}), que por sua vez é calculado com base na integração em cada volume de controle mostrada na Eq. (4.4).

$$C_{ef} = \frac{\int C_{ap} dV}{V} \quad (4.3)$$

onde V é o volume. A aplicação do método do calor específico efetivo permite o uso de intervalos de mudança de fase menores e intervalos de tempo maiores na discretização temporal, em comparação com o método do calor específico aparente. No entanto, a integração necessária para o cálculo do calor específico efetivo implica em um custo computacional adicional (Hu e Argyropoulos, 1996).

No método da integração do calor, a temperatura em todos os volumes de controle é monitorada. Cada dt é resolvido inicialmente sem considerar o calor latente. Nos volumes de controle onde a temperatura atinge ou ultrapassa o intervalo de mudança de fase, a equação da conservação da energia é ajustada. O ajuste consiste na adição de calor latente equivalente ao calor sensível transferido além da temperatura de mudança de fase (Poirier e Salcudean, 1988). A temperatura é corrigida e o processo de ajuste ocorre enquanto é necessária adição de calor latente para completar a mudança de fase no volume de controle. Após completar a mudança de fase no volume de controle, a resolução é continuada considerando somente o calor sensível (Hu e Argyropoulos, 1996).

4.1.2 Métodos com termo fonte

Nos métodos com termo fonte, é incluído um termo adicional na equação da conservação da energia. O termo fonte assume valores que variam entre zero para a fase sólida e o calor latente para a fase líquida. Por exemplo, o termo fonte (S_e) utilizado por Voller e Swaminathan (1991) é mostrado na Eq. (4.2).

$$S_e = -\rho L \frac{\partial \beta}{\partial t} \quad (4.4)$$

onde L é o calor latente e β é a fração líquida.

A principal vantagem dos métodos com termo fonte é a possibilidade de utilizar diversos formatos de equações para descrever a variação na entalpia durante os processos de mudança de fase, inclusive no caso de curvas com descontinuidades. Esta possibilidade torna-se útil no caso de ligas metálicas, quando é considerada a influência da composição do material e da solubilidade dos componentes na transição entre as fases (Voller e Swaminathan, 1991).

4.1.3 Métodos baseados na entalpia

Modelos baseados em entalpia apresentam como principal vantagem a capacidade de simular processos de mudança de fase isotérmicos ou com propriedades contínuas, porém, podem apresentar oscilações de temperatura ao longo do tempo em determinado ponto do domínio (Ma e Zhang, 2006). Nestes modelos, tais como o de Voller e Prakash (1987), a equação da energia se baseia na entalpia. Desta forma, a equação da conservação da energia é escrita conforme a Eq. (4.5).

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (4.5)$$

onde h é a entalpia total, definida pela soma das parcelas sensível e latente. A entalpia total pode ser modelada de diferentes formas, como por exemplo a utilizada por Swaminathan e Voller (1992), mostrada na Eq. (4.6).

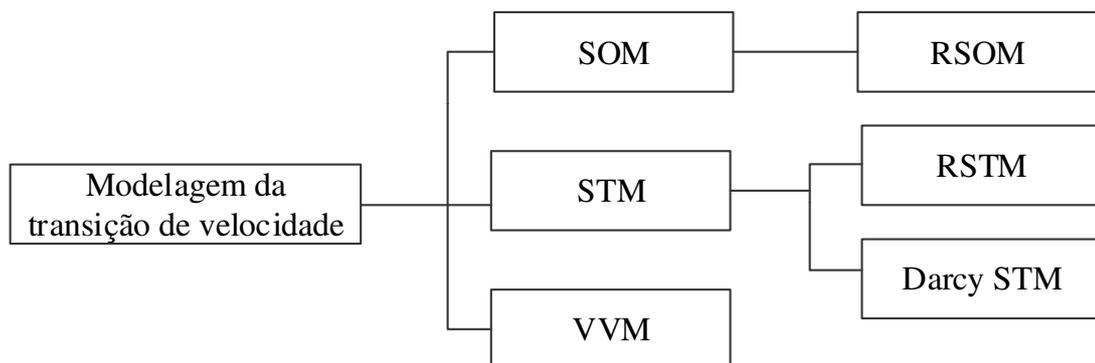
$$h = (1 - \beta) \int_{T_{ref}}^T \rho C_{p,s} dT + \beta \int_{T_{ref}}^T \rho C_{p,l} dT + \beta \rho L \quad (4.6)$$

onde T_{ref} é a temperatura de referência.

4.2 MODELAGEM DA TRANSIÇÃO DE VELOCIDADE

Quanto à modelagem da transição de velocidade entre as fases, os métodos são divididos em três grupos principais, de acordo com a modificação realizada na equação da quantidade de movimento: (a) método de “liga-desliga” ou SOM (*switch-off method*); (b) método de termo fonte ou STM (*source term method*) e (c) método da viscosidade variável ou VVM (*variable viscosity method*). Ainda são encontradas algumas variações dos métodos SOM e STM que apresentam funções de transição de modo a evitar problemas de descontinuidade da solução e facilitar a convergência. Estas variações são: (a) método de “liga-desliga” suavizado ou RSOM (*ramped switch-off method*); (b) método de termo fonte suavizado ou RSTM (*ramped source term method*) e (c) método Darcy STM (Ma e Zhang, 2006). A classificação dos modelos de transição de velocidade é mostrada na Figura 4.2.

Figura 4.2 – Classificação dos modelos de transição de velocidade entre as fases líquida e sólida



A modelagem da transição na velocidade é utilizada quando são incluídos os efeitos da convecção na fase líquida. O objetivo desta modelagem é descrever numericamente a transição que ocorre entre o escoamento da fase líquida e o comportamento estático do sólido. Na fase líquida, a aplicação de uma tensão de cisalhamento causa uma taxa de deformação,

enquanto na fase sólida, a aplicação de uma tensão de cisalhamento causa uma deformação elástica. A equação da quantidade de movimento, na forma básica sem modificações é mostrada na Eq. (4.7).

$$\frac{\partial \rho \vec{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \vec{V}) + \rho \vec{g} \quad (4.7)$$

onde p é a pressão, μ é a viscosidade dinâmica e \vec{g} é a aceleração da gravidade.

4.2.1 Métodos SOM (*switch-off method*)

Os métodos SOM consistem em uma solução simples para modelar a transição da velocidade entre o sólido e o líquido, nos quais o valor da velocidade é modificado para zero no sólido (Voller, Cross e Markatos, 1987). A alteração da velocidade pode ser realizada diretamente no código numérico de modo a sobrescrever o valor da velocidade para zero nos volumes de controle que se encontram abaixo da temperatura de mudança de fase (Morgan, 1981). Nestes métodos, a equação da quantidade de movimento não possui modificações, mantendo o formato mostrado na Eq. (4.7).

No entanto, o método SOM pode produzir descontinuidades no campo de velocidade, provocando inconsistência nos resultados. Estas descontinuidades são reduzidas nos métodos RSOM (*ramped switch-off method*), através de funções para promover uma transição suavizada. As funções de transição utilizam constantes numéricas de valor elevado para suprimir o movimento do sólido (Dutil et al, 2011). O uso destas funções resulta em uma região de interface com espessura diferente de zero, na qual ocorre a transição entre a velocidade do líquido e a condição estática do sólido (Ma e Zhang, 2006).

4.2.2 Métodos STM (*source term method*)

No grupo de métodos STM, é adicionado um termo fonte (S_{qm}) na equação da quantidade de movimento (Eq. 4.7), de modo a reduzir a velocidade da fase sólida. A função do termo fonte na equação da quantidade de movimento é assumir valores muito altos quando o material é sólido, fazendo com que a velocidade da massa sólida tenda a zero. No entanto,

este método também pode apresentar descontinuidades (Ma e Zhang, 2006). Nos métodos RSTM (*ramped source term method*), o termo fonte utiliza uma função para evitar descontinuidades de maneira semelhante ao RSOM (Dutil et al., 2011).

O método Darcy STM, apresentado por Voller e Prakash (1987) consiste em uma variação dos métodos STM, no qual o termo fonte se baseia na lei de Darcy para o escoamento em meios porosos. Desta forma, a porosidade no sólido tende a zero, fazendo com que o termo fonte domine a equação da quantidade de movimento e a velocidade se reduza a zero. A função que representa o termo fonte e demais informações referentes a este método são mostradas no modelo numérico do presente trabalho.

4.2.3 Método VVM (*variable viscosity method*)

No método VVM, proposto por Gartling (1980 apud Morgan, 1981), não é utilizado termo fonte, com a equação da quantidade de movimento assumindo a forma básica (Eq. 4.7). No entanto, é introduzido um aumento considerável na viscosidade para a fase sólida. O valor mais elevado na viscosidade reduz a velocidade através do aumento dos termos difusivos da equação da quantidade de movimento. Os resultados obtidos com o método VVM geralmente são satisfatórios (Voller, Cross e Markatos, 1987; Ghasemi e Molki, 1999). O aumento da viscosidade máxima normalmente produz melhores resultados, porém, exige maior tempo computacional (Kasibhatla et al., 2017). Apesar de ter sido proposto em 1980, um dos primeiros estudos a implementar este método é o de Cao e Faghri (1990). Com o aumento da capacidade dos computadores, o método VVM é mais difundido em estudos mais recentes, porém a quantidade de estudos que utilizam este método é reduzida, devido a esta maior necessidade de processamento e a dificuldades de convergência (Kozak e Ziskind, 2017).

Diferentes formulações são encontradas para descrever a variação da viscosidade entre as fases líquida e sólida no método VVM. De modo a comparar o incremento de viscosidade no sólido nos diferentes estudos, pode ser definida uma relação de viscosidade adimensionalizada μ_s/μ_l (Danaila et al., 2014). Na Tabela 4.1 são mostradas as funções e as relações de viscosidade utilizadas em diferentes estudos, onde B é uma constante numérica arbitrada.

Tabela 4.1 – Funções e relações de viscosidade em estudos utilizando o método VVM.

Referência	Função	μ_s/μ_l
Bennon e Incropera (1987)	$\mu = \mu_l / \beta$	∞
Voller, Cross e Markatos (1987)	$\mu = \mu_l + B(L - h_{la})$	10^3
Cao e Faghri (1990)	$\mu = \mu_l + \left(T - \frac{T_l - T_m}{T_l - T_s} \right) \frac{\mu_l + B}{T_l - T_s}$	10^{10}
Asako et al. (1994)	Não especificado	∞
Ma e Zhang (2006)	Não especificado	10^{30}
Samara, Groulx e Biwolé (2012)	Não especificado	$5,5 \times 10^8 - 5,5 \times 10^{10}$
Danaila et al. (2014)	Não especificado	10^8
Ziaei, Lorente e Bejan (2016)	Não especificado	10^4
Kasibhatla, König-Haagen e Brüggemann (2016)	Linear	$2,2 \times 10^7$
Kasibhatla et al. (2017)	Linear	$2,2 \times 10^5 - 2,2 \times 10^7$

4.3 MODELOS NUMÉRICOS DE MALHA FIXA UTILIZADOS EM ESTUDOS DE PCM

Uma vez que processos de fusão e solidificação apresentam como características principais o calor latente e a transição de velocidade, o uso de modelos numéricos para simular tais processos necessita de combinações de ao menos um método de cada grupo principal descrito nas Seções 4.1 e 4.2. Na modelagem numérica de processos físicos, é comum o uso de simplificações, tendo como objetivo facilitar a convergência na resolução das equações. Estas simplificações podem ser aplicadas à geometria, às propriedades dos materiais, aos fenômenos físicos associados com o problema ou às condições de contorno.

As principais simplificações aplicadas à geometria são o uso de condições de simetria e domínios unidimensionais ou bidimensionais ao invés de tridimensionais. A condição de simetria permite a modelagem de parte do domínio analisado, reduzindo a quantidade de elementos. Em geometria unidimensional ou bidimensional, além da redução na quantidade de elementos, ocorre a redução na quantidade de equações resolvidas. Desta forma, as duas simplificações geométricas representam reduções significativas no custo computacional.

Quanto às propriedades dos materiais, o uso de propriedades contínuas é comumente utilizado em conjunto com a simplificação de somente condução de calor. Em situações nas

quais a convecção é levada em consideração, a aproximação de Boussinesq é bastante utilizada. Nesta abordagem, a massa específica é considerada constante em todas as equações, exceto no termo referente às forças de corpo da equação da quantidade de movimento (Voller e Prakash, 1987). Desta forma, as correntes convectivas são levadas em consideração, sem dificultar a convergência da conservação da massa em decorrência da expansão ou contração do material provocada pela variação na massa específica entre as fases sólida e líquida.

Entre as simplificações aplicadas aos fenômenos físicos, a desconsideração da convecção representa uma grande redução no custo computacional, uma vez que ao considerar somente a condução térmica, os termos relativos ao escoamento do fluido são suprimidos das equações. No entanto, a precisão dos resultados é reduzida nestes casos, já que a convecção da porção líquida influencia o formato do sólido, conforme mostrado no Capítulo 3. Outras simplificações nos fenômenos físicos são: a desconsideração da tensão superficial entre o sólido e o líquido e a consideração do material como isotrópico e sem inclusões.

As condições de contorno do problema também representam em simplificações na modelagem numérica em relação aos problemas reais. As formas mais utilizadas de condições de contorno na superfície de transferência de calor em estudos numéricos de PCM são: fluxo de calor constante (Pal e Joshi, 2001) e temperatura constante, utilizada na grande maioria dos estudos. Nestas abordagens, são desconsiderados os efeitos do escoamento no meio externo ao invólucro, manifestados principalmente na variação no fluxo de calor em diferentes locais.

Em termos gerais, o aumento da complexidade em um modelo numérico aumenta a dificuldade na resolução, implicando no aumento do tempo de processamento. Estudos numéricos pioneiros em mudança de fase apresentam grande quantidade de simplificações, devido à capacidade limitada dos computadores. Com o incremento na capacidade de processamento dos computadores ao longo do tempo, torna-se viável a utilização de modelos mais complexos, incluindo maior detalhamento nas características do problema. Estudos que consideram a variação no volume do PCM durante a mudança de fase utilizam geometrias parcialmente preenchidas, considerando ar no restante da geometria. Estes casos requerem o uso de modelos multifásicos, de modo a considerar o ar e o PCM, como nos estudos de Estrázulas (2015) e Assis, Ziskind e Letan (2009). Quanto às condições de contorno, a variação no fluxo de calor em função da posição descreve os efeitos do escoamento do fluido de transferência de calor no meio externo ao PCM (Raymundo Júnior, 2017).

Nos modelos numéricos de mudança de fase, os métodos STM e SOM foram desenvolvidos assumindo a condição de velocidade zero na fase sólida (Ma e Zhang, 2006). Entretanto, no caso particular da fusão de contato, a velocidade da fase sólida não é zero,

apesar de ser muito baixa. Uma das alternativas para contornar esta situação foi encontrada no ajuste do parâmetro que governa a transição da velocidade entre as fases no método Darcy STM. Desta forma, o uso de valores deste parâmetro dentro de uma certa faixa permite a movimentação do sólido de modo satisfatório, como mostrado por Assis et al. (2007) e por Faistauer (2016) para o caso de esferas. O modelo com rastreamento de interface apresentado por Kozak e Ziskind (2017) foi desenvolvido especificamente para o processo de fusão de contato. No entanto, a complexidade deste método é maior em comparação com os demais métodos contínuos, principalmente em função dos cálculos necessários para rastreamento da interface entre sólido e líquido. O método VVM também vem sendo utilizado recentemente para processos de fusão de contato, como no estudo de Kasibhatla et al. (2017), porém com um aumento do tempo de processamento.

4.4 COMBINAÇÕES DE MODELOS DE MALHA FIXA

As quantidades de estudos encontrados na literatura utilizando cada combinação de métodos para modelar o calor latente e a transição de velocidade são mostradas na Tabela 4.2. Devido à menor quantidade de estudos, foram condensados em categorias únicas os métodos SOM e RSOM, STM e RSTM, assim como os métodos baseados em temperatura. De forma semelhante, o método Darcy STM foi considerado como uma categoria em separado dos demais STM, em função do maior número de estudos. Como é possível observar, a grande maioria dos estudos numéricos de PCM encontrados na literatura utilizam a combinação de método baseado em entalpia para modelagem do calor latente com Darcy STM para modelagem da transição de velocidade. Por ser bastante difundida, esta combinação de métodos também é conhecida como entalpia-porosidade.

Tabela 4.2 – Combinações de formulações utilizadas em estudos de PCM

		Formulação do calor latente		
		Termo fonte	Temperatura	Entalpia
Formulação da transição de velocidade	SOM/RSOM	1	1	-
	STM/RSTM	-	-	1
	Darcy STM	3	1	30
	VVM	4	4	3

Além das combinações mostradas na Tabela 4.2, alguns autores utilizam métodos mistos, que consistem no uso de mais de uma formulação para descrever ao menos um dos processos. Cao e Faghri (1990), por exemplo, utilizaram o método VVM combinado com as formulações de entalpia e calor específico aparente para a solidificação e fusão com diferentes intervalos de mudança de fase. A principal característica observada foi o aumento na dificuldade de convergência com o aumento do intervalo de mudança de fase. Ereik, Ilken e Acar (2005) utilizaram os métodos do calor específico aparente em conjunto com termo fonte na equação da conservação da energia para simular o processo de solidificação no exterior de tubo horizontal aletado, considerando somente condução térmica.

Alguns estudos comparam diferentes modelos numéricos para mudança de fase. A maioria dos testes são realizados em geometria retangular com as superfícies superior e inferior adiabáticas e transferência de calor em uma ou nas duas superfícies laterais. Em relação à formulação do calor latente, Poirier e Salcudean (1988) testaram as três formulações baseadas em temperatura, a formulação baseada em entalpia e uma combinação da formulação da entalpia com a formulação do calor específico aparente. Os resultados mostram principalmente que a aplicabilidade dos métodos depende do tipo de mudança de fase (isotérmica ou com propriedades contínuas) e da relação entre o calor sensível e o calor latente. Lamberg, Lehtiniemi e Henell (2004) compararam os métodos da entalpia e do calor específico efetivo para fusão e solidificação, notando pequenas diferenças nos resultados para diferentes intervalos de mudança de fase no método do calor específico equivalente.

Entre as formulações de transição da velocidade, Voller, Cross e Markatos (1987) compararam os métodos SOM, VVM e Darcy STM, combinados com a formulação da entalpia para o calor latente no processo de solidificação em cavidade retangular. A implementação foi considerada mais fácil com o método Darcy STM em comparação com os demais. Ma e Zhang (2006) compararam os métodos RSOM, RSTM e VVM, combinados com a formulação baseada no calor específico para o calor latente. Os resultados foram semelhantes, porém mais precisos para os métodos RSOM e RSTM em comparação com o VVM. Samara, Groulx e Biwole (2012) compararam o método VVM com um método misto de VVM e Darcy STM, ambos com a formulação do calor específico aparente para a energia, em cavidade retangular. A principal característica observada foi a convergência mais rápida para o método misto em comparação com o VVM.

5 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Inicialmente desenvolvidas em pesquisa, técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) são atualmente utilizados em diversos setores da indústria, tais como automotiva, aeroespacial, turbomáquinas e petróleo. A abordagem de CFD possui como princípio básico a divisão do domínio analisado em pequenas partes, de modo que seja possível aplicar equações algébricas ao invés de equações diferenciais, já que estas possuem poucas soluções conhecidas (Patankar, 1980). Os principais métodos empregados em CFD são: diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos. As principais diferenças entre os métodos residem na maneira com a qual as variáveis são aproximadas e com o processo de discretização (Versteeg e Malalasekera, 1995).

No método das diferenças finitas, o domínio é dividido em vários pontos. A equação diferencial fundamental é escrita para cada um dos nós da malha computacional e as derivadas são substituídas por diferenças entre os pontos (Chapra e Canale, 2010). As aproximações das derivadas das funções são obtidas normalmente através de expansões de Séries de Taylor truncadas (Versteeg e Malalasekera, 1995).

O método dos elementos finitos parte da divisão do domínio computacional em uma montagem de formas geométricas simples, chamadas elementos finitos (Reddy e Gartling, 2010). A solução aproximada para uma dada variável é obtida através de funções de aproximação e de interpolação para cada elemento, com posterior verificação em comparação com a equação diferencial (Chapra e Canale, 2010). A continuidade da solução e a redução de erros são realizadas através da aplicação de funções de ajuste e integração, sendo posteriormente obtidas as equações algébricas para as funções aproximadas (Versteeg e Malalasekera, 1995).

Em relação ao método dos volumes finitos, o domínio computacional é subdividido em volumes de controle que não se sobrepõem, sendo que cada volume contém um ponto da malha (Patankar, 1980). A solução das equações aproximadas é obtida através de balanços de conservação das propriedades envolvidas em cada volume de controle (Maliska, 1995). A discretização é realizada através de perfis por partes (Patankar, 1980) e a equação integral é convertida em um sistema de equações algébricas, resolvidas através de método iterativo (Versteeg e Malalasekera, 1995).

Além de códigos de CFD específicos desenvolvidos por pesquisadores, diversos softwares comerciais ou de código aberto existentes são utilizados atualmente. Os métodos utilizados por estes softwares são de elementos finitos (Ansys CFX, Autodesk CFD,

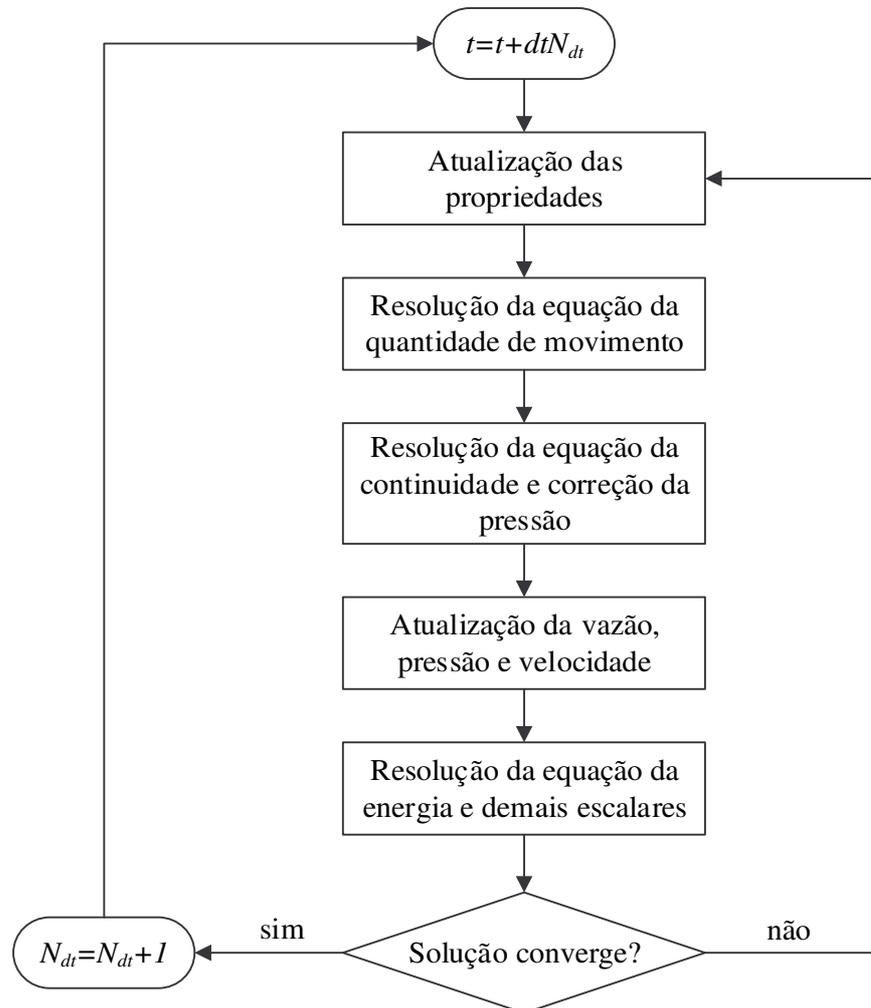
COMSOL) ou volumes finitos (Ansys Fluent, Star-CCM, Solidworks Flow Simulation, OpenFOAM). Em uma análise por CFD, seja com volumes finitos, diferenças finitas ou elementos finitos, as variáveis que representam a solução do problema devem possuir valores contínuos ao longo de todo o domínio computacional (Reddy e Gartling, 2010). Portanto, os valores das variáveis devem ser interpolados entre os pontos da malha para que esta condição seja satisfeita. O processo de resolução das equações que descrevem o problema (conservação da massa, energia e quantidade de movimento) pode ser realizado de diferentes maneiras, assim como a resolução dos gradientes das variáveis ao longo do domínio. Portanto, além do processo iterativo de resolução das equações, diferentes etapas fazem parte do processo de resolução, como o acoplamento pressão-velocidade, a interpolação das variáveis e a resolução dos gradientes. Na sequência são descritos alguns dos principais métodos empregados na resolução.

5.1 ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE

O acoplamento pressão-velocidade objetiva a obtenção de um campo de pressões que, produza um campo de velocidades que satisfaça a equação da conservação da massa quando inserido nas equações da quantidade de movimento (Maliska, 1995). Este processo é de grande importância na resolução das equações, uma vez que a obtenção das equações discretizadas das velocidades é facilitada se o gradiente de pressão for conhecido (Versteeg e Malalasekera, 1995).

Entre os métodos de acoplamento pressão-velocidade, o SIMPLE (*Semi Implicit Linked Equations*) é um dos mais difundidos, possuindo algumas variantes como SIMPLER (SIMPLE *Revised*; Patankar, 1980) e SIMPLEC (SIMPLE *Consistent*; Vandoormaal e Raithby, 1984), as quais não são utilizadas no presente trabalho. No método SIMPLE, a pressão é escrita como a soma da melhor estimativa para a pressão disponível com uma correção. Inicialmente, é estimado um campo de pressões e as velocidades são obtidas a partir deste campo. Posteriormente, é obtida a correção do campo de pressões e as velocidades são corrigidas a partir da correção da pressão. Por fim, a equação da conservação da energia e demais variáveis são resolvidas (SAS IP, 2015). Este processo é repetido até que a convergência seja alcançada (Maliska, 1995). Para processos transientes, o processo é repetido a cada intervalo de tempo (dt) em que a solução avança, conforme mostrado na Figura 5.1.

Figura 5.1 – Fluxograma do processo iterativo utilizado no método SIMPLE.



Fonte: Adaptado de SAS IP (2015).

A resolução no método PISO (*Pressure-Implicit with Splitting of Operators*) se assemelha ao método SIMPLE. No entanto, é introduzido uma etapa adicional para correção da pressão e da velocidade antes de aplicar os valores destas variáveis nas demais equações (Issa, 1985). Desta forma, a convergência é facilitada, sendo necessária uma quantidade menor de iterações em todas as equações (SAS IP, 2015). Já o algoritmo acoplado (*Coupled*) resolve as equações da continuidade e da quantidade de movimento em conjunto, na forma de um sistema de equações. O acoplamento é alcançado através da discretização implícita dos termos do gradiente de pressão na equação da quantidade de movimento e do escoamento nas faces das células (SAS IP, 2015).

5.2 MÉTODOS DE INTERPOLAÇÃO

Os valores dos escalares presentes nas equações são armazenados para os centros dos volumes de controle do domínio. A resolução dos termos convectivos requer os valores destes escalares nas faces dos volumes de controle (SAS IP, 2015). Desta forma, torna-se necessário o uso de algum método para interpolar os valores destes termos para as faces.

No método *First Order Upwind*, os termos difusivos são aproximados por diferenças centrais, que consiste na interpolação linear entre os centros dos volumes de controle. Os termos convectivos são aproximados de acordo com a direção da velocidade do escoamento (Maliska, 1995). O valor de uma variável Φ no centro da célula é assumido como o valor médio em todo o volume da célula. Desta forma, o valor de Φ na face de uma determinada célula é igual ao valor desta variável no centro da célula anterior (SAS IP, 2015). No método *Second Order Upwind*, os valores nas faces das células são computados utilizando reconstrução linear multidimensional (Barth e Jespersen, 1989) com expansão de série de Taylor dos valores nos centros das células (SAS IP, 2015).

O método *Power Law* utiliza a Eq. 5.1 para interpolar o valor de Φ .

$$\frac{\Phi(x) - \Phi_0}{\Phi_{\Delta x} - \Phi_0} = \frac{\exp\left(Pe \frac{x}{\Delta x}\right) - 1}{\exp(Pe) - 1} \quad (5.1)$$

onde os índices 0 e Δx se referem à posição inicial e final da célula, respectivamente; enquanto x é a posição na célula e Pe é o número de Péclet, definido pela Eq. (5.2).

$$Pe = \frac{u\Delta x}{\alpha} \quad (5.2)$$

onde u é a velocidade na direção analisada (no exemplo mostrado, em x), Δx é o comprimento da célula e α é a difusividade térmica.

A variação de Φ ao longo da célula se dá de acordo com o valor de Pe . Para $Pe = 0$, Φ varia linearmente, enquanto para $Pe > 1$ e $Pe < -1$, a interpolação se assemelha à do método *First Order Upwind* conforme aumenta o módulo do valor de Pe (Patankar, 1980).

5.3 INTERPOLAÇÃO DA PRESSÃO

O método de interpolação da pressão PRESTO (*Pressure Staggering Option*) utiliza a equação da conservação da massa aplicada na malha de arranjo desencontrado (*staggered grid*, Patankar, 1980), sendo a velocidade calculada nas faces dos volumes de controle de modo a computar a pressão nestes pontos (SAS IP, 2015).

5.4 RESOLUÇÃO DOS GRADIENTES

A resolução dos gradientes é utilizada para determinar os valores de um escalar nas faces dos volumes de controle e computar a 2ª derivada dos termos difusivos e de velocidade (SAS IP, 2015). Os métodos de resolução dos gradientes utilizados no presente trabalho são: *Green-Gauss Node-Based* e *Least Squares Cell Based*.

Os métodos baseados no teorema de Green-Gauss possuem variantes baseadas nas células e nos nós. Ambas computam o gradiente de uma variável Φ no centro da célula i através da Eq. (5.3).

$$(\nabla \Phi)_i = \frac{1}{V} \sum_f \Phi_{f,med} \vec{A}_f \quad (5.3)$$

onde $\Phi_{f,med}$ é o valor médio da variável na face da célula e \vec{A}_f é o vetor área da face.

No método *Green-Gauss Node-Based*, o valor médio de uma variável Φ na face de um volume de controle ($\Phi_{f,med}$) é determinado através da Eq. (5.4).

$$\Phi_{f,med} = \frac{1}{N_{n,f}} \sum_1^{N_{n,f}} \Phi_{nb,med} \quad (5.4)$$

onde $N_{n,f}$ é o número de nós na face e $\Phi_{nb,med}$ é a média ponderada dos valores de Φ nas células em torno dos nós. Esta média é calculada através da formulação proposta por Holmes e Connell (1989) e Rausch, Yang e Batina (1991).

Já no método *Least Squares Cell Based*, a solução é assumida com variação linear entre a célula que está sendo calculada (i) e as células adjacentes (nb). Desta forma, o gradiente é definido de acordo com a Eq. (5.5).

$$(\nabla\Phi)_i \cdot \Delta r_i = (\Phi_{nb} - \Phi_i) \quad (5.5)$$

onde Δr_i é o vetor que representa a distância entre o centroide da célula que está sendo calculada e o centroide da célula vizinha.

A principal vantagem do método baseado nos nós em comparação com o método baseado nas células é a maior acurácia nos resultados do gradiente, principalmente para elementos que apresentam distorção. Em contrapartida, o custo computacional é maior para o método baseado nos nós (SAS IP, 2015).

5.5 CONSISTÊNCIA DOS RESULTADOS E DESEMPENHO DA SIMULAÇÃO

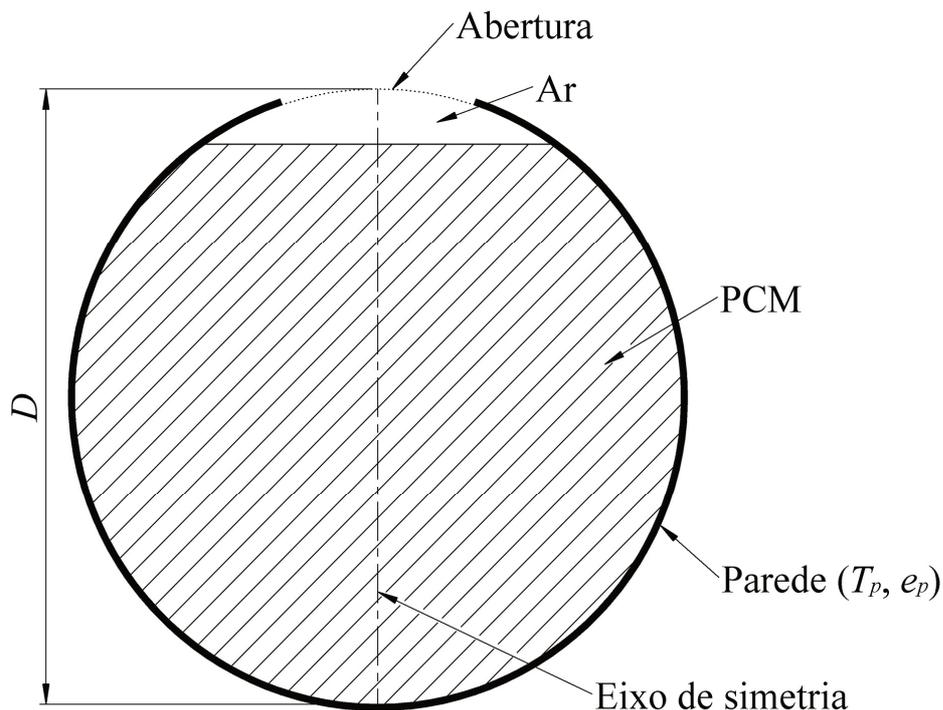
Apesar da evidente evolução dos computadores ao longo do tempo, o uso de CFD ainda exige uma capacidade de processamento considerável, principalmente para o caso de sistemas em regime transiente. Em estudos numéricos, a consistência dos resultados é assegurada através da validação e da verificação. A validação é feita através da comparação com dados experimentais, de modo a assegurar que os resultados obtidos numericamente sejam condizentes com os processos físicos. A verificação é realizada com o objetivo de aferir a solução numérica das equações presentes no modelo e pode ser realizada no código ou nas soluções (Roy, 2005). No presente trabalho é realizada a verificação das soluções, uma vez que a verificação do código envolve aspectos da programação e algoritmos do software que não fazem parte deste estudo. A forma mais simples de realizar a verificação das soluções é através da comparação direta dos resultados de testes de discretização temporal e espacial, de modo a evitar a influência de erros de discretização nos resultados.

Para verificação da discretização temporal, não foram encontrados métodos de específicos, sendo mais comum a avaliação das diferenças nos resultados obtidos com diferentes valores de intervalos de tempo. Já no caso da discretização espacial, o método mais difundido é o Índice de Convergência de Malha (GCI, *Grid Convergence Index*), apresentado por Roache (1994), baseado no método da Extrapolação de Richardson (Roache, 1997). Neste método são comparados os resultados obtidos com malhas de diferentes graus de refino. Valores de GCI baixos indicam uma menor influência da discretização nos resultados, sendo recomendados como ideais valores abaixo de 1,5 % (Castro et al., 2011).

6 APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA

O problema analisado no presente trabalho consiste em esfera, com diâmetro D , parcialmente preenchida com PCM e completada com ar. Para absorver as variações de volume de PCM sem que ocorra variação de pressão, a esfera genérica analisada possui uma abertura na região superior, conforme mostrado na Figura 6.1. O diâmetro da abertura equivale a 10 % do diâmetro da esfera. Na face externa da parede, é aplicada uma condição de temperatura prescrita (T_p), constante e uniforme, de modo a promover uma diferença ($\Delta T = T_p - T_m$) entre a temperatura média de mudança de fase ($T_m = (T_s + T_l)/2$) e a temperatura externa. Já na superfície interna da parede, foi considerada a condição de não deslizamento. O domínio é axissimétrico em torno do eixo vertical da esfera, sendo este centrado no eixo x do sistema de coordenadas, com a origem no ponto central.

Figura 6.1 – Geometria analisada no presente trabalho



A variação da massa específica entre as fases sólida e líquida foi considerada linear, e seus efeitos englobam a contração durante o processo de solidificação e a expansão durante o processo de fusão do PCM. O ar é considerado como gás ideal incompressível. Ou seja, os efeitos da pressão sobre a massa específica do mesmo são considerados. Desta forma, a massa específica do ar é definida pela Eq. (6.1) (SAS IP, 2015).

$$\rho = \frac{p_{op} M}{RT} \quad (6.1)$$

onde p_{op} é a pressão de operação, R é a constante universal dos gases ($R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$; Çengel e Ghajar, 2012) e M é o peso molecular ($M = 28,996 \text{ kg kmol}^{-1}$).

Os resultados obtidos no presente trabalho foram comparados com resultados de estudos experimentais existentes na literatura, portanto os materiais e as configurações geométricas foram definidos de acordo com tais estudos. O processo de fusão foi comparado com resultados do estudo experimental e numérico de Assis et al. (2007), enquanto o processo de solidificação foi comparado com resultados do estudo experimental e numérico de Assis, Ziskind e Letan (2009). Ambos os estudos utilizam esferas abertas parcialmente preenchidas com o PCM RT27, fabricado pela empresa Rubitherm Technologies GmbH. A mudança de fase deste PCM ocorre no intervalo entre $T_s = 28 \text{ °C}$ e $T_l = 30 \text{ °C}$, portanto trata-se de um processo de mudança de fase com propriedades contínuas. As características e dimensões pertinentes a cada caso são resumidas na Tabela 6.1.

Tabela 6.1 – Configurações dos processos analisados no presente trabalho.

Característica	Fusão	Solidificação
Diâmetro da esfera (D)	80 mm	40 mm
ΔT	10 °C	20 °C
Material da parede da esfera	Vidro	Plástico
Espessura da parede da esfera (e_p)	2 mm	0,1 mm
Proporção do volume da esfera inicialmente preenchido com PCM	85%	98,5%
Temperatura inicial	23 °C	32 °C

Além da temperatura inicial e da proporção da esfera preenchida com PCM, mostradas na Tabela 6.1, a pressão inicial é igual à atmosférica e a velocidade é zero em todo o domínio. As propriedades dos materiais utilizados nas simulações estão apresentadas na Tabela 6.2. No caso do PCM RT27, as propriedades foram obtidas de Assis et al. (2007), enquanto as propriedades do vidro foram obtidas de Bergman et al. (2011) e de Assis et al. (2007). Para a solidificação, no estudo de Assis, Ziskind e Letan (2009) não foi especificado o tipo de

plástico da parede da esfera, sendo então considerado polipropileno, cujas propriedades foram obtidas de Çengel e Ghajar (2012).

Tabela 6.2 – Propriedades dos materiais utilizados no presente trabalho.

Propriedades	RT27 sólido	RT27 líquido	Ar	Vidro	Polipropileno
C_p (J kg ⁻¹ K ⁻¹)	2400	1800	1006	750	1925
ρ (kg m ⁻³)	870	$\frac{760}{5 \times 10^{-4}(T - T_i) + 1}$	Eq. (6.1)	2500	910
k (W m ⁻¹ K ⁻¹)	0,24	0,15	0,0242	0,81	0,12
L (J kg ⁻¹)		179000	-	-	-
μ (kg m ⁻¹ s ⁻¹)	-	0,00342	$1,79 \times 10^{-5}$	-	-

7 ABORDAGEM NUMÉRICA

No presente trabalho, foram utilizados softwares comerciais da empresa Ansys nas versões 16.2 e 18.2. A malha foi elaborada com o ICEM-CFD, as simulações foram executadas no Fluent e o pós-processamento foi realizado no CFD-Post. Neste Capítulo, são descritos os aspectos referentes à abordagem numérica. Inicialmente, são detalhados os modelos de mudança de fase utilizados: Darcy STM, VVM e misto. Na sequência, é descrito o modelo multifásico, seguido pela descrição dos principais aspectos relativos ao processo de resolução das equações no software e dos controles da simulação. Em seguida, são listadas e detalhadas as simulações que foram executadas. Por fim, é apresentada a metodologia utilizada no pós-processamento para a obtenção de resultados.

7.1 MODELOS DE MUDANÇA DE FASE

O modelo numérico de fusão e solidificação utilizado pelo software Ansys Fluent (SAS IP, 2015) baseia-se no método da entalpia-porosidade (Voller e Prakash, 1987). Conforme descrito na Seção 4.4, este método consiste na combinação da modelagem da entalpia para o calor latente com o método Darcy STM (descrito no Capítulo 4) para a transição de velocidade entre as fases. Como na configuração padrão do software não constam outros modelos de fusão e solidificação, foram realizadas adaptações para implementar o método VVM, conforme descrito na Seção 7.1.2.

As equações em comum entre os métodos testados são as da conservação da massa e da conservação da energia, sendo que a equação da quantidade de movimento é formatada de acordo com o método utilizado para modelar a transição de velocidade entre o líquido e o sólido. A conservação da massa é descrita pela Eq. (7.1).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (7.1)$$

A conservação da energia é descrita pela Eq. (7.2):

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (7.2)$$

onde h é a entalpia total, obtida pela soma da entalpia sensível, (h_{se}) e da variação da entalpia na mudança de fase (h_{la}).

A entalpia sensível é calculada através da Eq. (7.3):

$$h_{se} = h_{ref} + \int_{T_{ref}}^T C_p dT \quad (7.3)$$

onde h_{ref} é a entalpia na temperatura de referência ($T_{ref} = 298,15$ K). A entalpia na mudança de fase é calculada através da Eq. (7.4):

$$h_{la} = \beta L \quad (7.4)$$

A fração líquida de PCM dentro do intervalo de mudança de fase é calculada através da Eq. (7.5):

$$\beta = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{se } T < T_s \\ 1 & \text{se } T > T_l \\ \frac{T - T_s}{T_l - T_s} & \text{se } T_s < T < T_l \end{array} \right\} \quad (7.5)$$

7.1.1 Método Darcy STM

No método Darcy STM, a região de interface entre o sólido e o líquido é tratada como uma zona porosa. A conservação da quantidade de movimento é descrita pela Eq. (7.6):

$$\frac{\partial \rho \vec{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \vec{V}) + \rho \vec{g} + S_{qm} \quad (7.6)$$

O termo fonte na equação da quantidade de movimento é calculado pela Eq. (7.7):

$$S_{qm} = \frac{(1-\beta)^2}{(\beta^3 + \varepsilon)} C \bar{V} \quad (7.7)$$

onde ε é um valor pequeno ($\varepsilon = 0,001$) para evitar divisão por 0 (zero) e C é a constante “*mushy zone*” (constante da zona porosa), que indica o amortecimento da velocidade do material até zero na fase sólida. Esta constante é ajustada de acordo com o problema analisado. Por definição, o valor de C deve ser suficiente para permitir escoamento na região de transição e suprimir a velocidade na fase sólida (Voller e Prakash, 1987).

7.1.2 Método VVM

O método VVM foi implementado através de uma função externa ao software, conhecida como UDF (*User-Defined Function*), para descrever a viscosidade em relação à fração líquida. Nos casos que utilizam este método, o termo fonte na equação da quantidade de movimento é zerado com $C = 0$, enquanto a UDF foi incluída de maneira interpretada. Foram testadas duas funções, adaptadas da função que descreve o termo fonte da quantidade de movimento, a exemplo da formatação utilizada por Samara, Groulx e Biwole (2012). As funções são descritas nas Eq. (7.8) e (7.9).

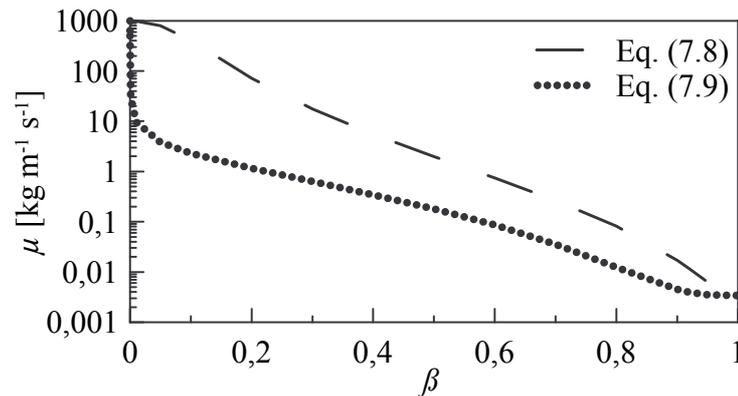
$$\mu = \mu_l + \frac{(1-\beta)^2}{(\beta^3 + \omega)} \quad (7.8)$$

$$\mu = \mu_l + \frac{(1-\beta)^3}{(\sqrt{\beta} + \omega)} \quad (7.9)$$

onde μ_l é a viscosidade do líquido e ω é uma constante para evitar divisão por zero e limitar a viscosidade máxima na fase sólida. Embora as Eq. (7.8) e (7.9), sejam bastante semelhantes, testes preliminares da Eq. (7.8) mostraram dificuldades de convergência em função do aumento da viscosidade para valores altos de β . Desta forma, foi testado o ajuste de expoentes na Eq. (7.9), que proporciona uma variação menor da viscosidade para valores de β mais próximos de 1, conforme mostrado na Figura 7.1. Em função disso, o menor valor utilizado foi de $\omega = 0,001$, incrementando μ para, no máximo, $10^3 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ na fase sólida

($\mu_s/\mu_l = 2,9 \times 10^5$). Valores de ω menores foram testados, porém não proporcionaram convergência da simulação. No Apêndice A é mostrado a programação utilizada nas UDF para implementação das funções da viscosidade.

Figura 7.1 – Variação da viscosidade em função da fração líquida nas funções utilizadas no método VVM com $\omega = 0,001$.



7.1.3 Método misto

No método misto foram testadas diferentes combinações de viscosidade máxima e constante C . As combinações foram definidas a partir das configurações que apresentaram melhores resultados com os métodos Darcy STM e VVM. As configurações de viscosidade no método misto compreendem a Eq. 7.9 com diferentes valores de ω , que foram limitados pela convergência alcançada. É importante salientar que, nos casos de solidificação foram utilizados valores de ω maiores que nos casos de fusão, também em função da convergência. Da mesma forma, as configurações do método Darcy STM que apresentam os melhores resultados para cada processo são diferentes. Portanto, o método misto apresenta configurações distintas para os processos de fusão e solidificação.

7.2 MODELO MULTIFÁSICO

Devido à presença de fluidos diferentes não misturados no problema analisado, é utilizado o modelo de volume de fluido (VOF – *volume of fluid*) (Hirt e Nichols, 1981). A fração volumétrica de fluido em uma célula computacional é definida pela Eq. (7.10).

$$\frac{\partial \gamma_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\gamma_k \vec{V}) = 0 \quad (7.10)$$

onde γ_k é a fração volumétrica do fluido “ k ” na célula computacional, cujo valor varia de 0 para a célula que não contém este fluido até 1 para a célula totalmente preenchida com o mesmo. O modelo assume como condição de contorno que a soma das frações volumétricas dos diferentes fluidos em uma dada célula é 1.

As equações da energia e da quantidade de movimento são resolvidas para o domínio todo, ponderando as propriedades dos fluidos em função da fração volumétrica (SAS IP, 2015). O valor ponderado de uma propriedade qualquer (Φ) é determinado pela Eq. (7.11).

$$\Phi = \sum \gamma_k \Phi_k \quad (7.11)$$

onde Φ_k é a propriedade do fluido k .

No modelo VOF, a fração volumétrica é calculada utilizando subintervalos de tempo (Δt), diferentes do intervalo utilizado na resolução das demais equações. Esta medida é necessária devido a limitação imposta pelo modelo, uma vez que são computados os escoamentos entre células adjacentes. Desta forma, o valor ideal para o intervalo de tempo fica entre 1/4 e 1/3 do tempo necessário para o fluido se deslocar por uma célula inteira (Hirt e Nichols, 1981). O parâmetro utilizado para definir o Δt é o número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), definido pela Eq (7.12).

$$CFL = \frac{u \Delta t}{\Delta x} \quad (7.12)$$

A formulação utilizada para definir o valor de Δt é a híbrida (SAS IP, 2015), que considera um balanço entre as contribuições das demais formulações, com base na velocidade (Δt_{vel}) e com base no escoamento (Δt_{esc}), definidas pelas Eq. (7.13) e (7.14), respectivamente.

$$\Delta t_{vel} = CFL \frac{\Delta x}{u} \quad (7.13)$$

$$\Delta t_{esc} = CFL \frac{V}{\sum Q_{sai}} \quad (7.14)$$

onde Q_{sai} é a vazão do fluido que sai da célula.

A interface entre os dois fluidos é discretizada através do método de reconstrução geométrica (*Geo-Reconstruct*). Neste método, interface é considerada linear em cada célula, através do balanço de fração volumétrica de cada fluido na célula que está sendo analisada e nas células adjacentes (Youngs, 1982). Em um primeiro passo, a posição da interface no interior da célula é determinada com base na fração volumétrica de cada fluido. Em seguida, é calculado o escoamento nas faces com base na posição da interface e nas velocidades de cada fluido. O processo é finalizado recalculando as frações volumétricas a partir das velocidades calculadas na etapa anterior (SAS IP, 2015). O valor mínimo de γ para os fluidos é definido por um limite de corte. Desta forma, valores de γ para um dado fluido abaixo do limite definido são arredondados para zero. Os valores testados para o limite de corte são 10^{-4} , 10^{-6} e 10^{-8} .

7.3 PROCESSO DE RESOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES

O software Ansys Fluent utiliza o método dos volumes finitos, e a resolução das equações é feita de forma iterativa, com a verificação da convergência ao final de cada iteração. No entanto, a equação na fração volumétrica não se segue em todo o processo iterativo. Esta é resolvida somente após a convergência das demais equações, quando o software avança para o próximo intervalo de tempo. Os critérios de parada são a quantidade de dt inicialmente estipulados ou interrupção manual.

7.3.1 Avanço temporal

A discretização temporal é feita utilizando a formulação implícita de primeira ordem, conforme Eq. 7.15 para uma variável Φ qualquer (SAS IP, 2015).

$$\Phi_{dt+1} = \Phi_{dt} + dtF(\Phi_{dt+1}) \quad (7.15)$$

onde a função F incorpora qualquer discretização espacial, o índice $dt+1$ se refere ao próximo intervalo de tempo e o índice dt se refere ao intervalo atual.

7.3.2 Variação dos intervalos de tempo

No caso com intervalo de tempo variável, a variação no valor do dt é realizada em função do valor máximo selecionado para o número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL_{max}), através da Eq. (7.16).

$$dt = \frac{CFL_{max}}{\max\left(\sum \frac{\dot{m}_{sai}}{V_i}\right)} \quad (7.16)$$

onde \dot{m}_{sai} é a vazão mássica que sai da célula e V_i é o volume da célula.

O valor de dt obtido na Eq. (7.16) é comparado com o valor de dt utilizado em cada intervalo. Caso sejam diferentes, ao avançar para o próximo intervalo, o valor de dt é substituído pelo valor obtido na Eq (7.16), desde que o incremento ou decréto esteja dentro dos limites estipulados, ou então reajustados de acordo com estes limites.

7.3.3 Verificação da convergência

A soma dos resíduos de cada variável é computada e registrada ao final de cada iteração. Para uma variável Φ , esta soma, definida por Ψ_ϕ , é corrigida por um fator de escala global, assumindo a forma mostrada na Eq. (7.17) (SAS IP, 2015).

$$\Psi_\phi = \frac{\sum_i \left| \sum_{nb} a_{nb} \Phi_{nb} + b - a_i \Phi_i \right|}{\sum_i |a_i \Phi_i|} \quad (7.17)$$

onde a é o coeficiente do centro da célula, b é a contribuição da parte constante (S_c) do termo fonte ($S = S_c + S_i \Phi$), o índice i se refere a célula e o índice nb se refere às células vizinhas. A

resolução das equações é considerada convergente quando o valor de Ψ_ϕ atinge o valor estipulado como critério de convergência.

7.4 CONTROLE DA SIMULAÇÃO

A face interna da parede da esfera possui a condição de não deslizamento. A abertura possui a condição “*Pressure outlet*”, com pressão manométrica constante de 0 Pa. O ar que entra pela abertura possui a mesma temperatura aplicada à face externa da parede. O domínio computacional é bidimensional e axissimétrico em relação ao eixo vertical da esfera. Os critérios de convergência das equações são 10^{-8} para a equação da energia e 10^{-5} para as equações da continuidade e da quantidade de movimento. Para cada intervalo de tempo (dt), são utilizadas no máximo 1000 iterações.

O método de discretização da pressão utilizado em todas as simulações é PRESTO. A discretização do gradiente utilizada com o método Darcy STM é *Least Squares Cell Based*, enquanto nos casos com método VVM é *Green-Gauss Node Based*, por melhorar a convergência da solução. Quanto aos demais métodos de solução das equações, foram testados os seguintes métodos: acoplamento pressão-velocidade SIMPLE, PISO e *Coupled*; discretização da energia e da quantidade de movimento *First Order Upwind*, *Second Order Upwind* e *Power Law*.

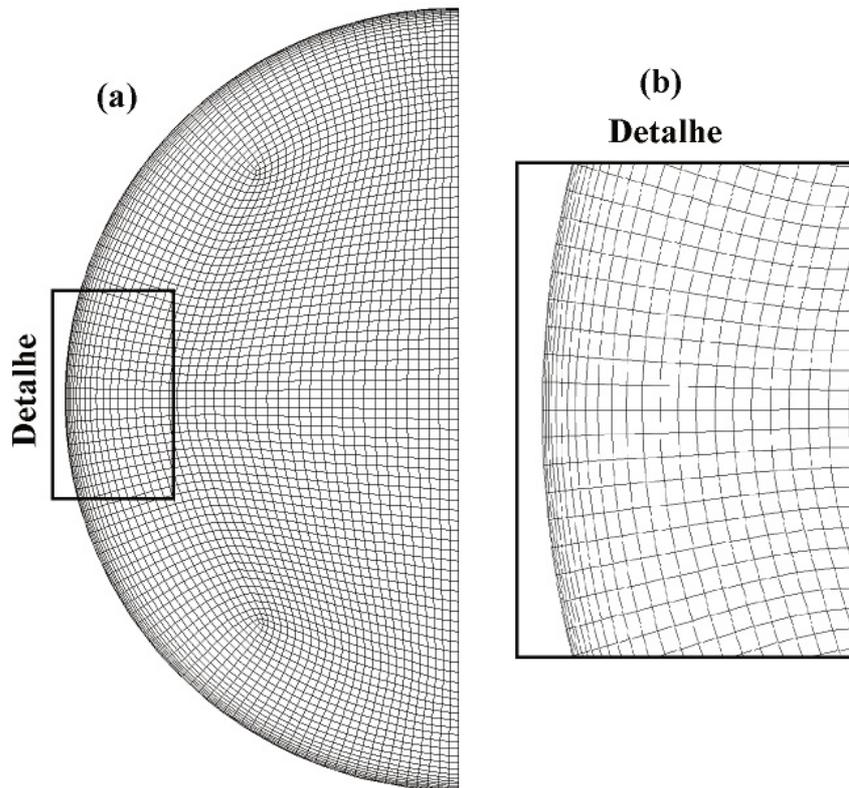
Para os casos que utilizam o método Darcy STM, os coeficientes de sub-relaxação são de 0,2 para a fração líquida; 0,8 para a energia e 0,5 para pressão, forças de corpo, massa específica e quantidade de movimento. Nos casos que utilizam os métodos VVM e misto, houve necessidade de redução dos coeficientes para 0,1 na fração líquida e 0,3 para pressão, 0,6 para energia e 0,4 para forças de corpo, massa específica e quantidade de movimento.

7.5 CONFIGURAÇÕES ANALISADAS

As malhas testadas são bidimensionais e possuem refino na região próxima da parede, conforme mostrado na Figura 7.2(a), no domínio todo, e Figura 7.2(b), detalhe da região próxima da parede. No presente estudo, foram utilizadas as mesmas malhas para os processos de solidificação e de fusão na maioria dos casos. A razão de crescimento na espessura dos elementos a partir da parede varia entre 1,08 e 1,3. Esta variação na razão de crescimento dos

elementos se deve aos ajustes realizados pelo software na geração da malha, uma vez que a espessura do primeiro elemento e a quantidade de elementos em cada direção foram fixadas para cada malha. Testes preliminares utilizando o método VVM indicaram que o aumento da razão de aspecto e a redução da qualidade ortogonal prejudicam a convergência. Este efeito é intensificado com a redução do número de elementos na malha.

Figura 7.2 – Malha computacional: (a) integral e (b) detalhe do refino junto da parede.



A Tabela 7.1 resume as principais características das malhas testadas: número de elementos (N_i), espessura do primeiro elemento junto da parede (e_i), razão de aspecto máxima e qualidade ortogonal. Os números nos nomes das malhas indicam graus de refino equivalentes. A letra “A” indica malhas nas quais a parede da esfera é modelada como resistência térmica, enquanto a letra “B” indica a modelagem da parede na malha, sendo esta utilizada em parte dos casos do processo de fusão, devido à maior espessura da parede neste processo. A diferença na espessura do primeiro elemento da malha 4-B em relação à malha 4-A foi inserida após verificação inicial da camada líquida no processo de fusão e se deve ao intuito de obtenção dos resultados específicos nesta região.

Tabela 7.1 – Malhas utilizadas no presente estudo.

Malha	N_i	e_i (mm)	Razão de aspecto máxima	Qualidade ortogonal
1-A	2784	0,15	9,10	0,91
2-A	3918	0,065	19,49	0,85
3-A	10486	0,05	12,96	0,83
4-A	16896	0,05	10,16	0,81
2-B	4224	0,065	24,59	0,87
4-B	18210	0,01	45,06	0,57

Os métodos de modelagem da transição de velocidade testados no presente trabalho são Darcy STM, VVM e misto, combinados com a formulação baseada em entalpia para o calor latente. No método Darcy STM, foi testado a constante C , enquanto no método VVM foi testada a função que descreve a transição de viscosidade entre as fases sólida e líquida. No método misto foram utilizadas combinações dos parâmetros dos dois métodos anteriores. Vale ressaltar que os valores dos parâmetros testados são diferentes entre os processos de fusão e de solidificação. Os casos analisados no presente trabalho compreendem testes de discretização espacial, discretização temporal e dos modelos de mudança de fase. As configurações testadas para os modelos de mudança de fase, malha e intervalos de tempo são resumidas na Tabela 7.2 para os casos de solidificação e na Tabela 7.3 para os casos de fusão.

Tabela 7.2 – Resumo dos casos de solidificação analisados no presente trabalho.

Análise	Caso	Método	C	ω	Malha	dt (s)
Discretização espacial	1	Darcy STM	10^8	-	1-A	0,005
	2	Darcy STM	10^8	-	2-A	0,005
	3	Darcy STM	10^8	-	3-A	0,005
	4	Darcy STM	10^8	-	4-A	0,005
Discretização temporal	5	Darcy STM	10^8	-	2-A	0,002
	6	Darcy STM	10^8	-	2-A	0,01
	7	Darcy STM	10^8	-	2-A	Variável
Configuração método Darcy STM	8	Darcy STM	10^6	-	2-A	0,005
	9	Darcy STM	10^9	-	2-A	0,005
	10	Darcy STM	10^{10}	-	2-A	0,005
	11	Darcy STM	10^{12}	-	2-A	0,005
Configuração método VVM	12	VVM	-	0,001 (Eq. 7.8)	3-A	0,001
	13	VVM	-	0,001 (Eq. 7.9)	3-A	0,001
Configuração método misto	14	Misto	10^8	1 (Eq. 7.9)	2-A	0,002
	15	Misto	10^8	2 (Eq. 7.9)	2-A	0,002

Adicionalmente aos casos mostrados na Tabela 7.2, foram executadas simulações do processo de solidificação baseadas no Caso 2 para testar os efeitos dos métodos de discretização e acoplamento pressão-velocidade.

Tabela 7.3 – Resumo dos casos de fusão analisados no presente trabalho.

Análise	Caso	Método	C	ω	Malha	dt (s)
Configuração método Darcy STM	1	Darcy STM	10^4	-	2-A	0,005
	2	Darcy STM	2×10^4	-	2-A	0,002
	3	Darcy STM	5×10^4	-	2-A	0,005
	4	Darcy STM	10^5	-	2-A	0,005
Discretização espacial e modelagem da parede	5	Darcy STM	10^4	-	2-B	0,005
	6	Darcy STM	2×10^4	-	3-A	0,005
	7	Darcy STM	2×10^4	-	4-B	0,005
Configuração método VVM	8	VVM	-	0,001 (Eq. 7.8)	2-A	0,001
	9	VVM	-	0,001 (Eq. 7.9)	2-A	0,001
	10	VVM	-	0,001 (Eq. 7.9)	2-B	0,001
	11	VVM	-	0,001 (Eq. 7.9)	4-B	0,001
Configuração método misto	12	Misto	10^3	0,001 (Eq. 7.9)	2-B	0,001
	13	Misto	10^4	0,001 (Eq. 7.9)	2-B	0,001
	14	Misto	10^4	0,01 (Eq. 7.9)	2-B	0,001
	15	Misto	10^3	0,01 (Eq. 7.9)	2-B	0,001

7.6 PÓS-PROCESSAMENTO

Os resultados obtidos para os processos de fusão e solidificação a partir das simulações numéricas são: fração líquida fluxo de calor na superfície. No caso específico da fusão de contato, foram analisados os parâmetros específicos relacionados à camada líquida entre o PCM sólido e a superfície de transferência de calor: velocidade descendente do sólido, espessura da camada líquida, vazão e perfil de velocidade.

7.6.1 Avaliação da discretização espacial

A avaliação da discretização espacial foi realizada utilizando o GCI (*Grid Convergence Index*), utilizando o método descrito por Celik et al. (2008), que é detalhado no

Anexo A. Este método é aplicado a grupos de três malhas com números diferentes de elementos, sendo a variável analisada do tipo global ou local. No presente trabalho, a variável global analisada é a fração líquida para os processos de fusão e de solidificação. Adicionalmente, para o processo de fusão, foi realizada uma análise a partir da espessura da camada líquida, por representar uma variável local de significativa importância para o processo.

7.6.2 Avaliação do desempenho das simulações

Como não foram encontrados na literatura métodos para avaliar o desempenho das simulações, no presente trabalho foi desenvolvido o método descrito a seguir para realizar esta avaliação. Este método é bastante simplificado e considera somente o tempo computacional, o tempo simulado e o número de elementos do domínio computacional. Por não incorporar detalhamentos relativos ao número de equações presentes no modelo numérico e demais configurações numéricas que influenciam no desempenho, este método não é considerado como um indicador absoluto. No entanto, se aplicado a simulações de um mesmo processo físico, pode ser utilizado para comparar diferentes métodos, malhas ou computadores utilizados na simulação.

O método de avaliação de desempenho consiste em duas etapas de normalização dos dados referentes à simulação. A primeira etapa da normalização é realizada a partir do número de intervalos de tempo, obtendo-se a taxa de avanço da solução no tempo (dt) através da Eq. (7.18).

$$dt = \frac{N_{dt}}{tc} \quad (7.18)$$

onde N_{dt} é o número de intervalos de tempo resolvidos na simulação e tc é o tempo computacional necessário para resolver o número de intervalos de tempo.

Na segunda etapa da normalização, são incluídos os dados da malha para obter a taxa de resolução (η) através da Eq. (7.19).

$$\eta = N_i dt \quad (7.19)$$

onde N_i é o número de elementos da malha.

O tempo computacional avaliado é obtido ao longo das simulações a partir do intervalo de tempo entre arquivos salvos automaticamente. Os intervalos utilizados foram apenas entre arquivos salvos durante períodos nos quais não houve interrupção da simulação para minimizar a quantidade de interferências nos resultados. Foram avaliadas somente simulações nas quais foi possível obter um mínimo de 10 amostras de intervalos de tempo. Vale ressaltar que foram avaliados os valores médios de η , uma vez que diversos fatores além da simulação numérica propriamente dita podem influenciar no processamento. Dentre estes fatores, os que mais influenciam diretamente no desempenho são outros processos em execução, componentes do sistema operacional ou ajuste da frequência do processador em função da temperatura (Brooks e Martonosi, 2001).

7.6.3 Resultados para os processos de fusão e solidificação

Parte das variáveis utilizadas para determinar os resultados é obtida através de integração numérica ponderada pela massa no domínio computacional. Esta integração para uma variável Φ qualquer é realizada através da Eq (7.20) (SAS IP, 2015).

$$\Phi_t = \int \Phi \rho dV = \sum_{i=1}^{N_i} \Phi_i \rho_i V_i \quad (7.20)$$

onde ρ_i é a massa específica na célula computacional i . Como o domínio é bidimensional e possui um eixo de simetria, a integração numérica é resolvida de forma bidimensional. Para computar a integração no volume total, o resultado é multiplicado por 2π .

A fração líquida determina a proporção de material na fase líquida e pode ser determinada em função do volume (Tan e Fok, 2010) ou da massa (Assis, Ziskind e Letan 2009). Como a variação na massa específica é considerada no presente trabalho, o volume de PCM no interior do domínio é variável. Portanto, torna-se mais adequado o uso da fração líquida em função da massa, definida através da Eq. (7.21).

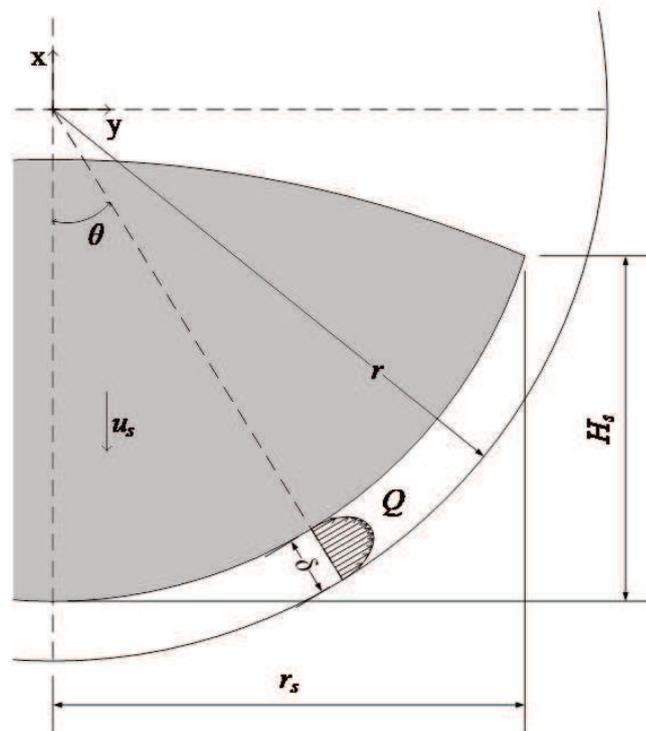
$$\beta = \frac{m_l}{m_T} \quad (7.21)$$

onde m_l é a massa de PCM líquido e m_T é a massa total de PCM, ambas obtidas por integração numérica, considerando $\Phi = \beta\gamma_{PCM}$ para determinar m_l e $\Phi = \gamma_{PCM}$ para determinar m_T .

7.6.4 Resultados específicos da fusão de contato

Os resultados específicos da fusão de contato se referem à camada líquida e são comparados com equações oriundas de estudos analíticos, uma vez que não foram encontrados estudos com medições diretas destes parâmetros. Estas equações consideram o processo de mudança de fase isotérmico e com a esfera completamente preenchida. Como o caso analisado no presente trabalho é um processo de mudança de fase com propriedades contínuas, a camada líquida foi considerada como a região com $\beta \geq 0,5$ para realizar as comparações. No entanto, devido a estas diferenças, são esperados desvios nos resultados numéricos em relação às equações. A Figura 7.3 ilustra as variáveis utilizadas na análise descritas a seguir. É importante salientar que a dimensão da camada líquida na figura se encontra fora de escala para facilitar a visualização.

Figura 7.3 – Variáveis utilizadas na análise da fusão de contato.



A vazão volumétrica (Q) que passa por uma superfície descrita pela camada líquida em um ângulo θ ao redor do eixo vertical é descrita pela Eq. (7.22) (Bahrami e Wang, 1987).

$$Q = \frac{-\pi \text{sen}(\theta)}{6\mu} \frac{dp}{d\theta} \delta^3 \quad (7.22)$$

onde δ é a espessura da camada líquida e o termo $dp/d\theta$ é descrito pela Eq. (7.23).

$$\frac{dp}{d\theta} = \frac{-6\mu r^2 \rho_l^3 L^3 |u_s|^4 \cos^3(\theta) \text{sen}(\theta) \left(\frac{\rho_s}{\rho_l}\right)^4}{k_l^3 \Delta T^3} \quad (7.23)$$

onde r é o raio da esfera e u_s é a velocidade de descida do sólido.

A espessura da camada líquida é determinada a partir do estudo de Emerman e Turcotte (1983), através da Eq. (7.24).

$$\delta = \frac{k_l}{C_{p,l} \rho_s |u_s| \cos(\theta)} \left[\frac{-3}{4} Ste - 5 + \left(\frac{9}{16} Ste^2 + \frac{70}{4} Ste + 25 \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (7.24)$$

onde Ste é o número de Stefan, obtido através da Eq. (7.25).

$$Ste = \frac{C_{p,l} \Delta T}{L} \quad (7.25)$$

A velocidade de descida do sólido é obtida através da Eq. (7.26) (Bejan, 1992).

$$\frac{u_s l_0}{\alpha_l} = 0,92 \frac{\rho_l}{\rho_s} Ste^{\frac{3}{4}} \left(\frac{\Delta p l_0^2}{\mu \alpha_l} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (7.26)$$

onde l_0 é a escala de comprimento da camada líquida e Δp é a pressão exercida pelo sólido sobre a camada líquida. A escala de comprimento é definida como a razão entre a área de contato da camada líquida com a superfície aquecida e o perímetro desta área projetado no plano perpendicular à força normal. Já a pressão exercida pelo sólido é a razão entre a força normal e a área horizontal projetada pela porção sólida (Goldstein, Sparrow e Jones, 1973).

Conforme definido no estudo de Bejan (1992), l_0 é considerado como o raio da esfera e a pressão exercida pelo sólido sobre a camada líquida é obtida através da Eq. (7.27).

$$\Delta p = \frac{2}{3} g D (\rho_s - \rho_l) \quad (7.27)$$

Vale ressaltar que o estudo de Emerman e Turcotte (1983) considera o deslocamento de uma esfera sólida com geração de calor através de um meio sólido que possui temperatura de mudança de fase abaixo da temperatura da esfera. Como as equações para a velocidade de deslocamento da porção sólida e da vazão na camada líquida se baseiam no estudo citado, diferenças entre os resultados medidos e estas equações podem ocorrer devido a esta diferença de configuração. Outras condições que podem produzir diferenças significativas também são utilizadas pelos autores, como: processo de mudança de fase isotérmica; esfera completamente preenchida com PCM; velocidade do sólido constante ao longo do tempo. Desta forma, além de diferenças inerentes à condição de preenchimento da esfera e do processo de mudança de fase, a espessura da camada líquida e a vazão na camada líquida também se tornam constantes.

Alternativamente, foram testadas versões transientes das Eq. (7.22), (7.24) e (7.26). Levando em consideração que o formato e a proporção de material sólido variam ao longo do tempo, a pressão exercida pelo sólido sobre a camada líquida e a escala de comprimento da camada líquida são variáveis. A partir da definição teórica destes termos, é possível deduzir as versões transientes dos mesmos.

A pressão exercida pelo sólido na forma transiente é calculada através da Eq. (7.28).

$$\Delta p = \frac{g m_s}{\pi r_s^2} \left(1 - \frac{\rho_l}{\rho_s} \right) \quad (7.28)$$

onde m_s é a massa de PCM sólido e r_s é o raio da maior seção da porção sólida.

A escala de comprimento da camada líquida na versão transiente é calculada através da Eq. (7.29).

$$l_0 = \frac{A_{sc}}{P_{sc}} \quad (7.29)$$

onde A_{sc} é a área da superfície aquecida em contato com a camada líquida ou área de contato e P_{sc} é o perímetro desta área. A área de contato é definida pela Eq. (7.30).

$$A_{sc} = 2\pi r H_s \quad (7.30)$$

onde H_s é a altura do ponto mais alto do sólido em contato com a superfície aquecida. O perímetro é definido através da Eq. (7.31).

$$P_{sc} = 2\pi r_s \quad (7.31)$$

Os resultados de vazão na camada líquida, espessura da camada líquida e velocidade descendente do sólido obtidos com as equações (7.22), (7.24) e (7.26) são comparadas com os resultados numéricos. Estes resultados são obtidos no pós-processamento, através da inclusão de funções no software para realizar as medições das variáveis. A vazão na camada líquida é obtida a partir do perfil de velocidade nesta região, utilizando a Eq. (7.32)

$$Q = V_{med} A_\delta \quad (7.32)$$

onde V_{med} é a velocidade média na camada líquida na posição angular analisada e A_δ é a área de escoamento na camada líquida em toda a circunferência da esfera na posição angular analisada, obtida através da Eq. (7.33).

$$A_\delta = \pi \delta \sin \theta (D - \delta) \quad (7.33)$$

Os demais resultados são medidos diretamente a partir dos resultados. A camada líquida é considerada a região entre a parede da esfera e o ponto com $\beta = 0,5$ na linha descrita pelo ângulo analisado, sendo a espessura e a vazão consideradas nesta região. A velocidade do sólido é definida como a média da componente vertical da velocidade na região com $\beta \leq 0,05$. Este valor foi considerado para evitar a influência do escoamento na região de transição entre sólido e líquido.

A partir do fluxo de calor na região da camada líquida, foi obtido o número de Nusselt na camada líquida (Nu_δ), através da Eq. (7.34).

$$Nu_{\delta} = \frac{q''_{\delta,med} D}{\Delta T k_l} \quad (7.34)$$

$q''_{\delta,med}$ é o fluxo de calor médio na camada líquida. O número de Nusselt global (Nu_g) é obtido através da Eq. (7.35)

$$Nu_g = \frac{q''_{med} D}{\Delta T k_l} \quad (7.35)$$

onde q''_{med} é o fluxo de calor médio na parede da esfera.

Os resultados são adimensionalizados ao longo do tempo através do número de Fourier (Fo), definido pela Eq. (7.36)

$$Fo = \frac{k_l t}{\rho_l C_{p,l} r^2} \quad (7.36)$$

8 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados são divididos em duas partes principais. Na primeira são mostrados e analisados os resultados referentes ao processo de solidificação, enquanto na segunda parte são analisados os resultados obtidos para o processo de fusão. Para cada processo, são analisados os resultados obtidos com cada método testado em comparação com resultados presentes na literatura. Em uma segunda etapa da análise, são comparadas as configurações de cada método que apresentaram os resultados mais condizentes com os estudos da literatura, de forma a verificar qual dos métodos apresenta maior semelhança com os resultados experimentais. Adicionalmente, para o processo de fusão, é apresentada uma análise da camada líquida em comparação com equações presentes em estudos da literatura.

8.1 PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO

Nesta seção, são apresentados os resultados obtidos no processo de solidificação. Na primeira parte desta seção, os resultados quantitativos e qualitativos de fração líquida obtidos no presente trabalho são comparados com os resultados experimentais e numéricos de Assis, Ziskind e Letan (2009). Adicionalmente, são mostrados resultados de fluxo de calor local ao longo da parede da esfera e fluxo de calor médio na parede ao longo do tempo, obtidos no presente trabalho. A segunda parte desta seção compreende os testes de discretização temporal, discretização espacial e métodos de discretização, além da análise do desempenho das simulações no processo de solidificação.

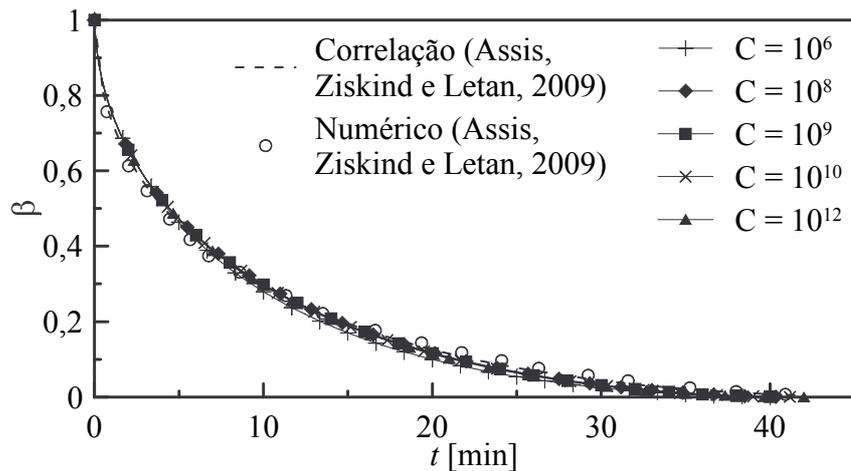
8.1.1 Testes dos modelos de mudança de fase

Os testes dos modelos de mudança de fase no processo de solidificação compreendem os Casos 1 e de 8 à 15, descritos na Tabela 7.2. Os Casos que apresentaram os resultados mais condizentes com os resultados de Assis, Ziskind e Letan (2009) com cada método são comparados entre si de modo a avaliar a opção que melhor representa o processo de solidificação estudado.

8.1.1.1 Método Darcy STM

Nas simulações executadas utilizando o método Darcy STM, foram testados os seguintes valores da constante C : 10^6 , 10^8 , 10^9 , 10^{10} e 10^{12} . Nestas análises, foram utilizados $dt = 0,005$ s com a malha 2-A. Na Figura 8.1, são mostrados os resultados de fração líquida obtidos no presente trabalho e os resultados de Assis, Ziskind e Letan (2009) ao longo do tempo. É possível observar que os resultados são bastante semelhantes aos resultados de Assis, Ziskind e Letan (2009) para os diferentes valores de C testados. O caso que mais destoa dos demais é o que utiliza $C = 10^6$, no qual é necessário um tempo 11 % menor para solidificar 90 % da massa de PCM ($\beta < 0,1$). Para os demais valores de C , a diferença em relação aos resultados de Assis, Ziskind e Letan (2009) é menor que 5 %.

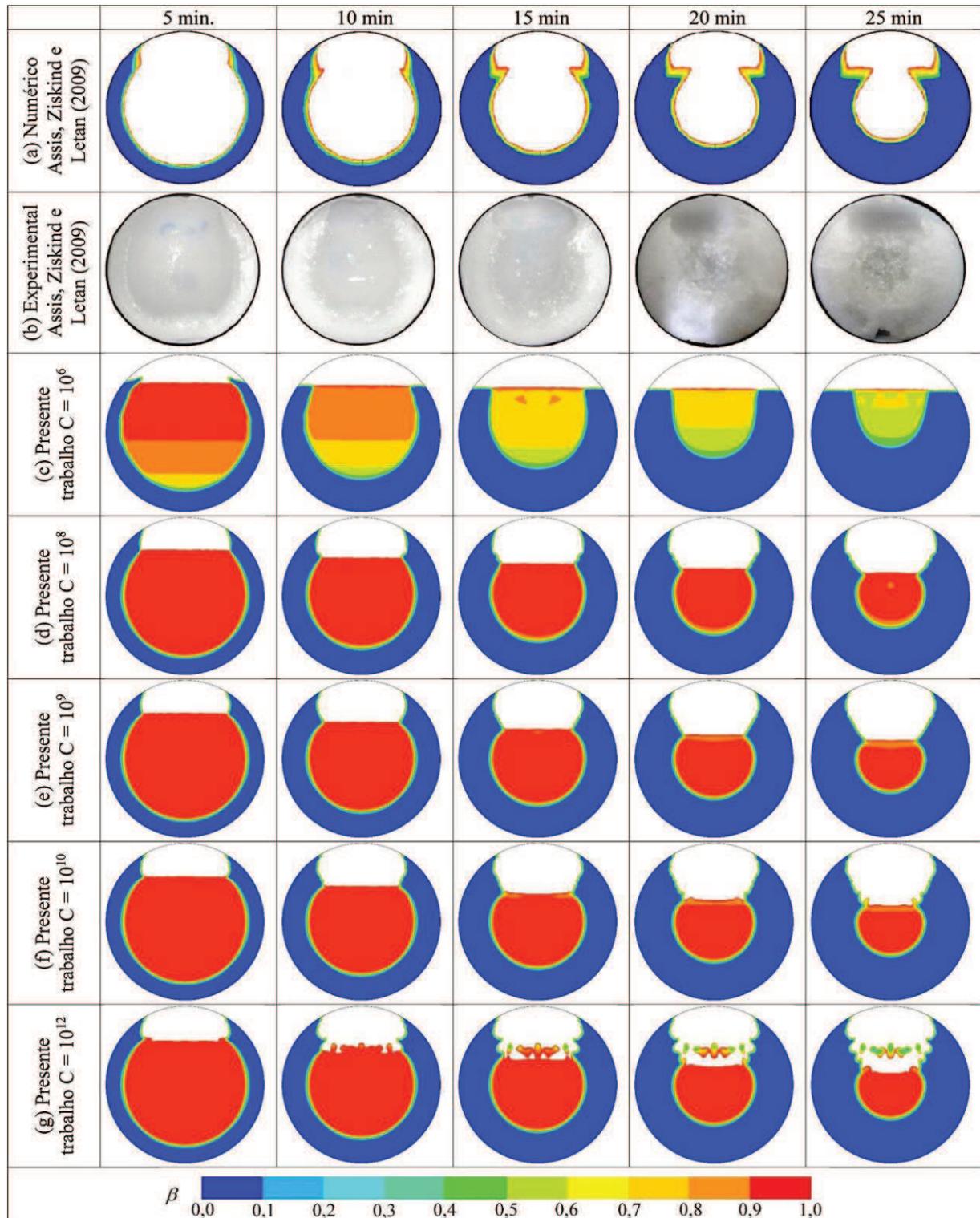
Figura 8.1 – Fração líquida ao longo do tempo na solidificação para diferentes valores de C no presente trabalho e nos resultados de Assis, Ziskind e Letan (2009).



Apesar da semelhança nos resultados quantitativos de fração líquida, são notadas diferenças significativas nos campos de fração líquida. Na Figura 8.2 são mostrados os campos de fração líquida para diferentes valores de C , com resultados numéricos do presente trabalho e experimentais e numéricos de Assis, Ziskind e Letan (2009), nos instantes de $t = 5$, 10, 15, 20 e 25 min. Nas imagens que mostram os resultados numéricos, o PCM sólido é mostrado em azul e o PCM líquido é mostrado em vermelho, enquanto o ar é representado pela região branca na porção superior da esfera. Para valores baixos de C , como $C = 10^6$ (Figura 8.2 (c)), o sólido se movimenta excessivamente, impossibilitando a permanência da porção sólida junto da parede da esfera na região superior, além de formar um padrão de estratificação, que é observado principalmente em $t = 5$ e 10 min. Já nos casos com $C = 10^8$

(Figura 8.2(d)) e 10^9 (Figura 8.2(e)), os campos de fração líquida mostram maior semelhança no formato do sólido com os resultados experimentais e numéricos de Assis, Ziskind e Letan (2009).

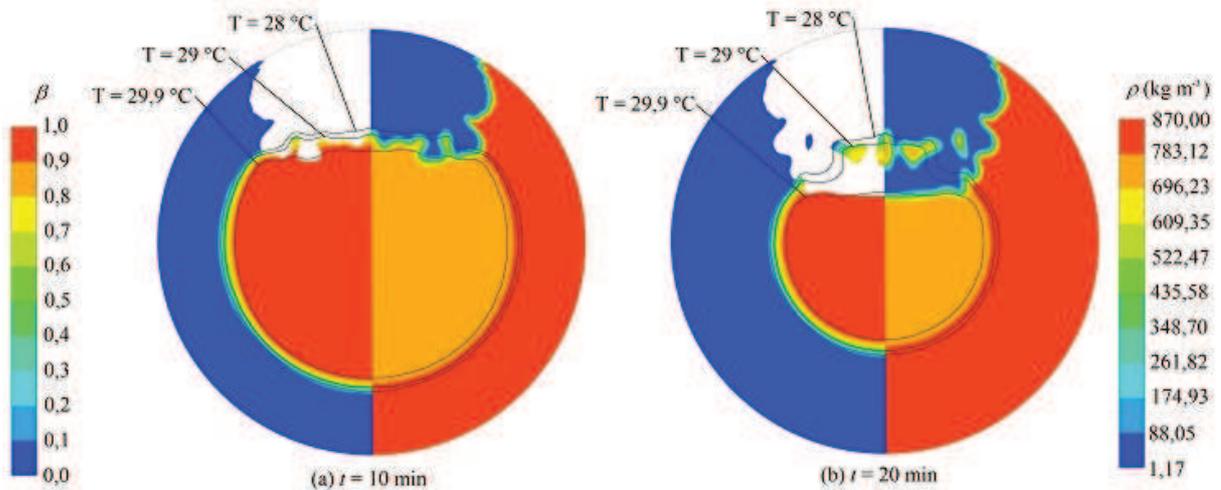
Figura 8.2 – Campos de fração líquida de RT27 do presente trabalho e resultados numéricos e experimentais de Assis, Ziskind e Letan (2009), para $t = 5, 10, 15, 20$ e 25 min; $C = 10^6$ à 10^{12} .



Conforme pode ser observado na Figura 8.2(f), com $C = 10^{10}$, o aumento no valor de C produz formação não realista da interface ar-PCM. Nesta figura pode-se observar algumas ondulações na região de interface entre o PCM sólido, o PCM líquido e o ar, principalmente nos instantes $t = 20$ e 25 min. Estas ondulações são intensificadas com o aumento de C , conforme mostrado na Figura 8.2(g), com $C = 10^{12}$, onde estas ondulações já são visíveis com $t = 10$ min. Neste caso, ainda é possível observar a partir de $t = 15$ min a formação de partículas sólidas suspensas, que também não ocorrem na situação real.

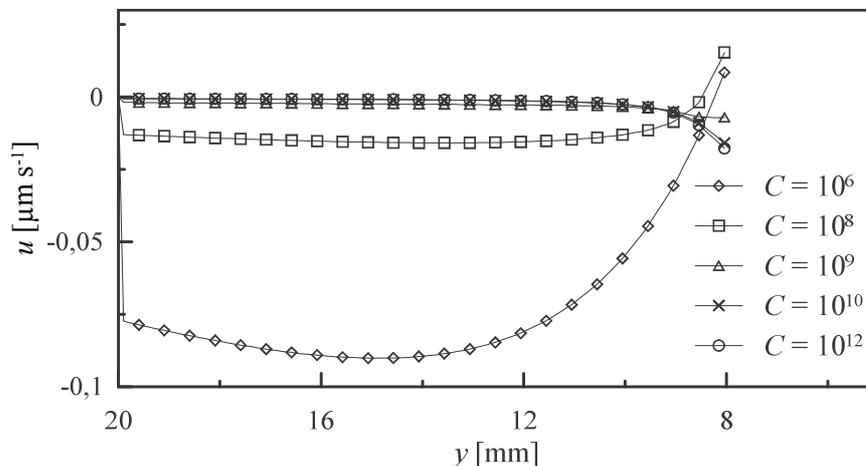
A formação da anomalia com partículas sólidas suspensas no caso com $C = 10^{12}$ ocorre devido à temperatura do ar em contato com a região superior do líquido. Nesta configuração, o calor retirado do PCM pelo ar, mesmo que em pequena quantidade, induz uma pequena redução na fração líquida, fazendo com que a contribuição do termo fonte na equação da quantidade de movimento seja significativa o suficiente para suprimir a velocidade do PCM, de modo a formar as partículas suspensas. Este processo é ilustrado através de isotermas sobrepostas aos campos de fração líquida e de massa específica mostrados na Figura 8.3(a, b), para $C = 10^{12}$ em $t = 10$ e 20 min, respectivamente. Nas imagens, a metade esquerda da esfera mostra a fração líquida do PCM (com $\gamma_{PCM} > 0,5$), enquanto a metade direita da esfera mostra a massa específica considerando o ar e o PCM. As linhas isotérmicas de $28, 29$ e $29,9$ °C mostram o intervalo de mudança de fase do PCM. Em $t = 10$ min (Figura 8.3(a)), é possível observar que a temperatura na região de interface ar-PCM atinge valores dentro do intervalo de mudança de fase. O valor elevado de C faz com que o PCM nesta região permaneça estático, formando assim as partículas sólidas suspensas, mostradas em $t = 20$ min (Figura 8.3(b)). Embora não sejam realistas, estas partículas ocorrem devido à combinação da condição térmica com a configuração numérica. Desta forma, a temperatura do ar se torna um dos fatores que limita o valor máximo de C para casos de solidificação de PCM com ar.

Figura 8.3 – Campos de fração líquida e massa específica, com isoterma sobrepostas à região de mudança de fase, para $C = 10^{12}$ em: (a) $t = 10$ min e (b) $t = 20$ min.



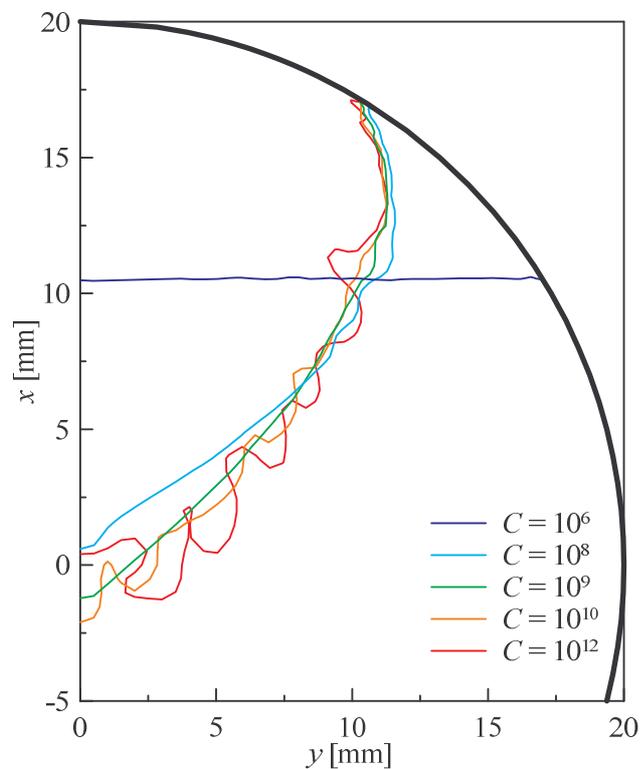
Como a constante C influencia no deslocamento do sólido, foi avaliada a velocidade do mesmo para os diferentes valores de C testados. Na Figura 8.4 são mostrados os perfis da componente vertical da velocidade (u) na região sólida ao longo da linha horizontal que passa pelo centro da esfera ($x = 0$) em $t = 30$ min, onde y é a posição horizontal a partir do centro da esfera, sendo a parede em $y = 20$ mm. Pode-se observar nesta figura que o aumento do valor de C provoca uma redução da velocidade do sólido, mantendo sua posição mais fixa. Porém, as velocidades são mais semelhantes entre si para os casos com valores mais elevados ($C = 10^{10}$ e 10^{12}). Já para os menores valores de C , a exemplo de $C = 10^6$, a velocidade aumenta significativamente, causando deslocamento excessivo do sólido.

Figura 8.4 – Perfil de velocidade vertical na região sólida na linha horizontal central para os valores de C testados em $t = 30$ min.



A maior velocidade vertical do sólido, a qual é obtida com os menores valores de C , conforme visto na Figura 8.4, é determinante no formato da interface ar-PCM ao final do processo. A Figura 8.5 apresenta a interface ar-PCM para diferentes valores de C no término do processo de solidificação. Como pode ser observado nesta figura, no caso com $C = 10^6$, o deslocamento mais intenso do sólido faz com que a interface assuma um perfil plano em toda a sua extensão, enquanto nos demais casos, a interface permanece mais elevada junto da parede e mais baixa na região central. As ondulações na interface para $C = 10^{10}$ e 10^{12} condizem com os campos de fração líquida mostrados na Figura 8.2, sendo desconsideradas as partículas suspensas para $C = 10^{12}$. Para os casos com $C = 10^8$ e 10^9 , a interface apresenta perfil mais contínuo, sendo que a principal diferença entre os casos é observada na região central, onde se acumula uma quantidade maior de sólido no caso com $C = 10^8$, elevando a interface. Este acúmulo maior de sólido na região central para $C = 10^8$ condiz com as velocidades maiores no sólido observadas na Figura 8.4.

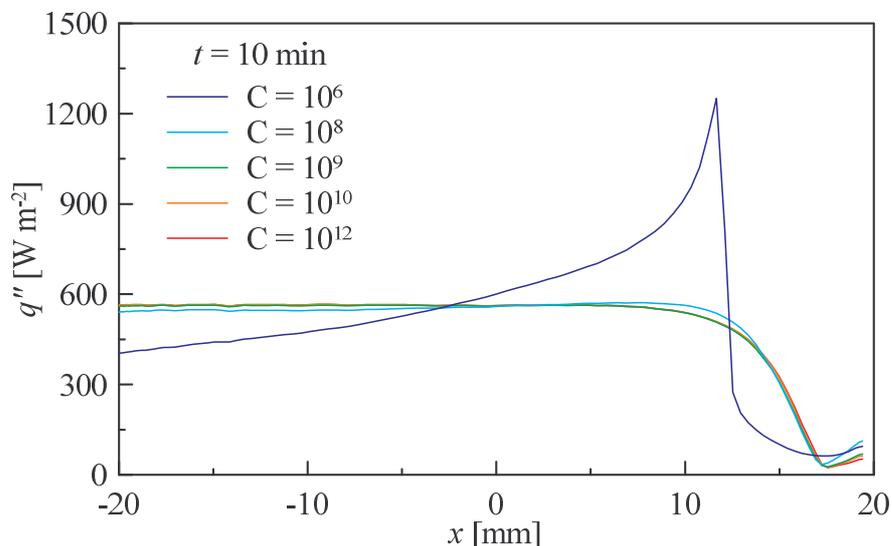
Figura 8.5 – Formato da interface ar-PCM ao final do processo de solidificação para os diferentes valores de C testados.



Além da fração líquida, o fluxo de calor médio na parede da esfera (q''_{med}) também apresenta resultados bastante próximos para todos os valores de C testados. No entanto, o fluxo de calor local ao longo da parede (q'') apresenta diferenças. A Figura 8.6 mostra o fluxo

de calor em função da posição vertical para $t = 10$ min, sendo observada uma significativa diferença na curva que representa $C = 10^6$ em relação aos demais valores de C , para os quais as curvas são semelhantes. Na região superior da esfera, na qual a parede permanece em contato com ar, q'' é significativamente menor. Desta forma, todos os casos apresentam uma redução de q'' na região superior, que é mais brusca para $C = 10^6$ em comparação com os demais casos. Esta redução gradual para os casos com C mais elevado condiz com o formato do sólido, que aumenta sua espessura a partir da região superior, impondo assim uma resistência térmica que varia gradualmente ao longo da porção superior do sólido.

Figura 8.6 – Fluxo de calor local ao longo da parede da esfera para os valores de C testados em $t = 10$ min no processo de solidificação.



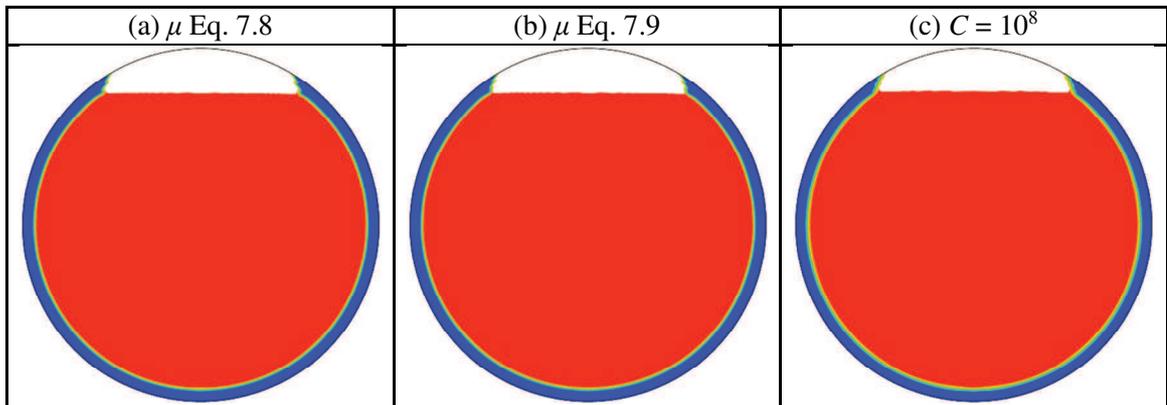
8.1.1.2 Método VVM

O uso do método VVM (método da viscosidade variável) implica em dificuldade de convergência, sendo necessárias alterações de configuração para alcançar a convergência da solução. Estas alterações compreendem a alteração da discretização do gradiente e redução dos coeficientes de sub-relaxação conforme já descrito, bem como a redução de dt para 0,001 s e utilização de malha 3-A, com 10486 elementos. Mesmo assim, a convergência da solução permaneceu até aproximadamente 60 s, quando ocorreram divergências.

Dentro do intervalo de tempo no qual a convergência na solução foi alcançada nas simulações com o método VVM, foram analisados os resultados de fração líquida em comparação com o método Darcy STM com $C = 10^8$. Os valores de fração líquida nos três

casos são bastante semelhantes entre si, com diferença inferior a 1 %. Em comparação com a correlação de Assis, Ziskind e Letan (2009) dentro do intervalo de 60 s, os valores de fração líquida também são bastante semelhantes, com diferenças inferiores a 5%. As semelhanças de resultados podem ser vistas na Figura 8.7(a-c), que mostra os campos de fração líquida em $t = 40$ s: para o método VVM utilizando a Eq. (7.8), para o método VVM utilizando a Eq. (7.9) e para o método Darcy STM com $C = 10^8$, respectivamente. Nas imagens não são observadas diferenças significativas no formato do sólido, mostrando resultados satisfatórios do método VVM enquanto a convergência é alcançada. No entanto, o custo computacional deste método é aumentado devido a necessidade de maior refino na malha e menores dt .

Figura 8.7 – Campos de fração líquida em $t = 40$ s para o método VVM utilizando: (a) Eq. (7.8), (b) Eq. (7.9) e (c) método Darcy STM com $C = 10^8$.

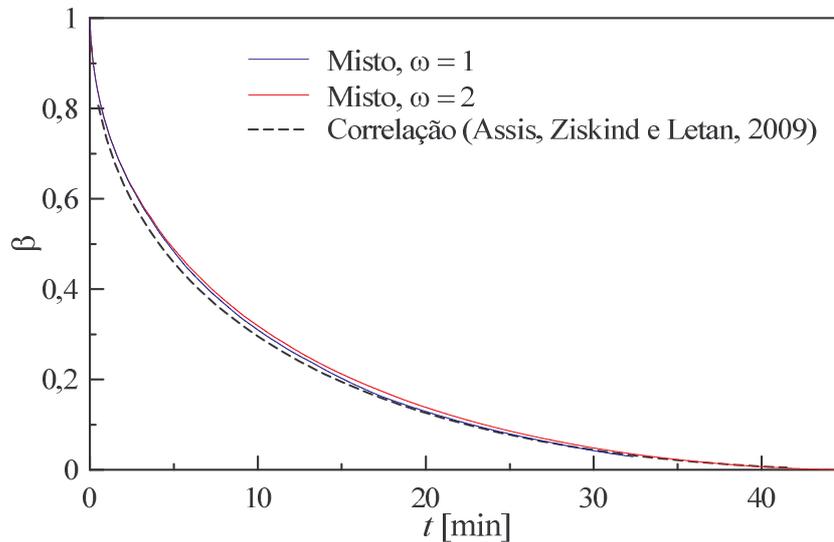


8.1.1.3 Método misto

Os parâmetros utilizados inicialmente no método misto foram $C = 10^8$ e a viscosidade utilizando a Eq. 7.9, com $\omega = 0,001$. No entanto, não foi obtida convergência com esta configuração, sendo testados valores maiores de ω . O aumento do valor desta variável e consequente redução da viscosidade para a fase sólida facilitou a convergência, sendo que os menores valores que produziram convergência foram $\omega = 1$ e $\omega = 2$. No entanto, no Caso 14 ($\omega = 1$) ocorreu divergência após 1940 s. Os resultados de fração líquida ao longo do tempo são mostrados na Figura 8.8 para os casos utilizando o método misto em comparação com a correlação de Assis, Ziskind e Letan. No gráfico, é possível observar que a fração líquida é semelhante ao longo do tempo para as duas configurações do método misto em relação à

correlação. Entre os demais resultados, os campos de fração líquida e o fluxo de calor médio ao longo do tempo são praticamente iguais para as duas configurações testadas.

Figura 8.8 – Fração líquida ao longo do tempo no processo de solidificação para o método misto e para a correlação de Assis, Ziskind e Letan (2009).



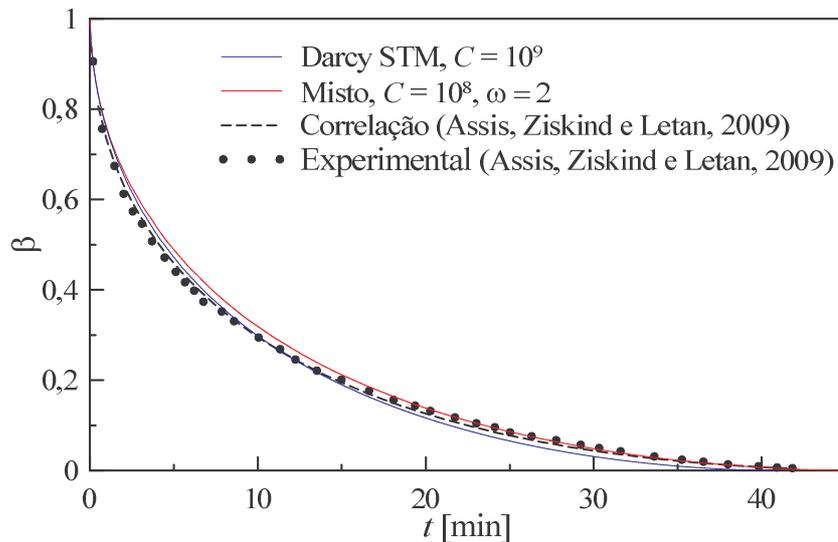
O aumento do valor de ω e conseqüente redução da viscosidade máxima no sólido facilitaram a convergência. No entanto, mesmo com a utilização de menores valores viscosidade máxima para o PCM sólido com $\omega = 2$, foi necessário utilizar $dt = 0,001$ s, portanto, menores que no método Darcy STM. Desta forma, o tempo de simulação foi consideravelmente maior para o método misto, representando um grande aumento no custo computacional em comparação com o método Darcy STM.

8.1.1.4 Comparação dos métodos testados

As configurações que representaram os resultados mais semelhantes aos de Assis, Ziskind e Letan (2009) foram $C = 10^9$ para o método Darcy STM e $C = 10^8$ com $\omega = 2$ para o método misto. A Figura 8.9 mostra perfis de β obtidos com estas configurações, bem como os experimentais e obtidos com a correlação de Assis, Ziskind e Letan (2009). Nesta figura, é possível verificar que, em ambos os métodos, a fração líquida ao longo do tempo é semelhante aos resultados de Assis, Ziskind e Letan (2009). No entanto, os resultados obtidos com o método Darcy STM são mais próximos aos de Assis, Ziskind e Letan (2009) no início

do processo, enquanto os resultados obtidos com o método misto são mais próximos no final do processo.

Figura 8.9 – Fração líquida ao longo do tempo no processo de solidificação, para os métodos misto e Darcy STM em comparação com os dados experimentais e com a correlação de Assis, Ziskind e Letan (2009).



O fluxo de calor local ao longo da parede da esfera, assim como o fluxo de calor médio ao longo do tempo são bastante semelhantes para os métodos Darcy STM e misto. Da mesma forma, os campos de fração líquida obtidos com o método misto foram bastante semelhantes aos obtidos com o método Darcy STM com $C = 10^8$. Conseqüentemente, a posição da interface no final do processo também foi bastante semelhante. No entanto, o tempo total de solidificação é mais próximo dos resultados de Assis, Ziskind e Letan (2009) para o método misto, com uma diferença de 3% no tempo necessário para solidificar 95% do PCM em relação à correlação de Assis, Ziskind e Letan (2009). Já para o método Darcy STM, esta diferença é de 10%. Mesmo com um maior desvio no tempo total de solidificação, o método Darcy STM pode ser considerado mais viável quando ponderado o tempo computacional necessário, uma vez que neste método foi possível utilizar $dt = 0,005$ s, enquanto no método misto foram utilizados $dt = 0,001$ s. Desta forma, o tempo necessário para completar uma simulação com a mesma malha aumenta de 6 dias com o método Darcy STM para 30 dias com o método VVM.

8.1.2 Testes das configurações numéricas

Nesta Seção são apresentados resultados referentes às configurações numéricas. Inicialmente, são analisados os testes de discretização espacial e temporal. Após estas análises, são apresentados os resultados dos testes dos métodos de discretização e acoplamento pressão-velocidade. Por fim, é realizada a análise do desempenho das simulações. Os resultados analisados nesta Seção compreendem os Casos de 1 a 7 descritos na Tabela 7.2.

8.1.2.1 Testes de discretização espacial

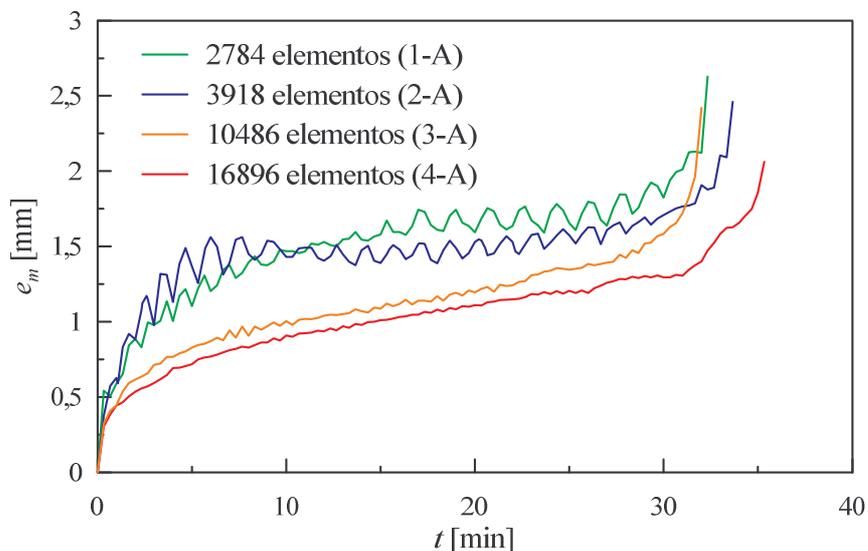
Para testar a discretização espacial no processo de solidificação, foram utilizadas as seguintes malhas: 1-A, 2-A, 3-A e 4-A, com 2784, 3918, 10486 e 16896 elementos, respectivamente, conforme descrito na seção 7.5. Os testes de discretização foram executados com $dt = 0,005$ s e $C = 10^8$. Os resultados de fração líquida para todas as malhas são bastante semelhantes, tanto qualitativos quanto quantitativos. Para comparar os resultados, são utilizados os valores de fração sólida ($1-\beta$), uma vez que os valores de β tendem a zero ao longo do processo. As maiores diferenças na fração sólida em relação à correlação de Assis, Ziskind e Letan (2009) ocorrem nos instantes iniciais, com o refino da malha reduzindo levemente as diferenças. Para $t = 30$ s, a diferença na fração sólida em relação à correlação é de 13,5 % para a malha 1-A e de 12,1 % para a malha 4-A, assumindo valores intermediários para as demais. No entanto, esta diferença é inferior a 5 % para todas as malhas para $t = 3$ min.

A consistência dos resultados é verificada utilizando o GCI, através do método mostrado no Anexo A (Celik et al., 2008). Como esta verificação é feita em grupos de três malhas, foram realizadas duas etapas, a primeira para as malhas 1-A, 2-A e 3-A e a segunda para as malhas 2-A, 3-A e 4-A, ambas utilizando a fração sólida. Na verificação das malhas com menos refino, os valores do GCI atingem um pico de 10 % aos 20 min, apesar de permanecerem abaixo de 4 % durante a maior parte do processo. Já para as malhas 2-A, 3-A e 4-A, os resultados apresentam maior consistência, com os valores do GCI abaixo de 1 % durante todo o processo.

Uma vez que o maior gradiente presente nos processos de mudança de fase é a região de transição entre o sólido e o líquido, a espessura da região de transição (e_m) também foi

analisada. A espessura foi definida como a distância entre os pontos com $(0,1 < \beta < 0,9)$ em uma linha que passa pelo centro da esfera na direção horizontal. Como pode ser observado na Figura 8.10, as malhas 1-A e 2-A, com menos refino, apresentaram maiores oscilações na espessura em comparação com as malhas 3-A e 4-A, mais refinadas. Estas oscilações, associadas à maior espessura da região de transição nos casos com menos refino, indicam que o tamanho dos elementos no interior do domínio não é suficiente para representar adequadamente a região entre o sólido e o líquido. Portanto, a malha 3-A se mostrou adequada para o processo de solidificação, uma vez que o tamanho das oscilações para este caso não apresenta grandes variações em comparação com a malha 4-A. Ainda é importante salientar que os aumentos na espessura da região de transição após 30 min se devem ao valor de β em toda a região líquida remanescente junto ao centro da esfera estar abaixo de 0,9. Portanto este resultado nos instantes finais não é representativo para analisar os efeitos da discretização espacial.

Figura 8.10 – Espessura da camada de transição no processo de solidificação para as 4 malhas testadas.



8.1.2.2 Testes de discretização temporal

Os testes de discretização temporal foram realizados com $dt = 0,002$, $0,005$ e $0,01$ s fixos e variável. A configuração de dt variável foi testada, pois o início do processo apresenta maior dificuldade de convergência em comparação com o final do processo. Os parâmetros

utilizados foram: dt variando entre 0,002 e 0,1 s, incremento máximo de 0,1 %, decréscimo máximo de 0,2 % e 5000 dt iniciais fixos de 0,002 s.

No caso testado, o valor máximo de CFL foi fixado em 0,8. No entanto, como as velocidades são baixas durante todo o processo, prevalece a alteração de dt limitada pelo máximo incremento na maioria dos intervalos. Esta configuração mostrou como principal vantagem a redução no tempo total de simulação de aproximadamente 30 % em comparação com o caso que utiliza $dt = 0,005$ s.

Os resultados quantitativos e qualitativos de fração líquida foram bastante semelhantes em todos os casos. As diferenças na fração sólida entre as diferentes configurações permaneceram abaixo de 1 % durante todo o processo. Portanto, o uso de dt variável se mostrou vantajoso do ponto de vista de custo computacional.

8.1.2.3 Testes dos métodos de discretização e acoplamento pressão-velocidade

Foram testados três métodos de acoplamento pressão-velocidade disponíveis no software Ansys Fluent: SIMPLE, PISO e *Coupled*. Quanto aos métodos de discretização da equação da conservação de energia e da quantidade de movimento, foram testados os métodos *First Order Upwind*, *Second Order Upwind* e *Power Law*. Estes testes foram realizados utilizando a malha 2-A, com 3918 elementos. Na comparação dos resultados de fração líquida para os métodos de discretização, não foram observadas diferenças significativas. O desvio máximo no valor da fração sólida entre os métodos permaneceu abaixo de 0,4% ao longo de todo o processo. A espessura da camada de transição apresentou pequenos desvios, principalmente entre o método *Second Order Upwind* e os demais. No entanto, o aumento da espessura no final do processo em decorrência da aproximação da interface ao centro da esfera ocorre posteriormente para o método *Second Order Upwind*, com uma diferença de aproximadamente 2 min.

Os métodos de acoplamento pressão-velocidade testados produziram valores de fração líquida bastante semelhantes ao longo do tempo nos resultados entre os métodos SIMPLE, PISO e *Coupled*. Os desvios na fração sólida não ultrapassaram 0,6 % entre os métodos ao longo do processo. Quando à espessura da camada de transição, os métodos PISO e *Coupled* produziram resultados semelhantes, enquanto o método SIMPLE apresentou desvio em relação aos demais a partir dos 15 min. Portanto, apesar de poucas diferenças observadas nos

resultados, o método SIMPLE apresentou menor precisão na definição de gradientes acentuados, como é o caso da região de transição entre sólido e líquido.

Os resultados de fluxo de calor médio e local na parede foram bastante semelhantes, sem desvios observáveis, tanto na comparação dos métodos de discretização quanto na comparação dos métodos de acoplamento pressão-velocidade. Quanto à velocidade de convergência, não foram observadas diferenças significativas entre os métodos de discretização testados. Entre os métodos de acoplamento pressão-velocidade testados, o método PISO necessitou um tempo aproximadamente 30 % superior em relação ao método SIMPLE, porém com menor quantidade de iterações necessárias para alcançar a convergência, principalmente nos instantes iniciais. No entanto, não foi possível quantificar a diferença no número de iterações entre os métodos. O maior tempo necessário se deve à etapa adicional de correção da pressão e da velocidade que o método PISO utiliza. Já o método *Coupled* necessitou o dobro da quantidade de tempo em relação ao método PISO, portanto representa um custo computacional significativamente maior em comparação com os demais métodos.

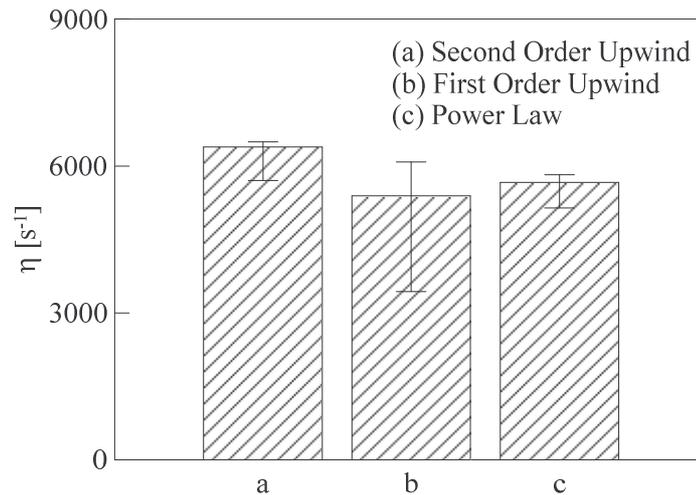
8.1.2.4 Desempenho das simulações

O desempenho das simulações foi avaliado utilizando o método descrito na seção 7.6.2, com a obtenção da taxa de resolução (η). Nas simulações com o método Darcy STM, não foram observadas diferenças significativas de η para diferentes valores de C ou dt , quando executadas em um mesmo computador. Considerando simulações com a malha 2-A com diferentes valores de C e diferentes dt , que foram executadas em um mesmo computador, os resultados médios de η permaneceram entre 5000 e 6000 s⁻¹. Já as malhas mais refinadas, quando executadas no mesmo computador, proporcionaram η maiores, em torno de 9000 s⁻¹ no caso da malha 3-A.

Os testes dos métodos de acoplamento pressão-velocidade e discretização foram executados em um mesmo computador, portanto podem ser comparados com maior precisão em relação às demais análises. A Figura 8.11 mostra os valores médios de η para os métodos de discretização testados, sendo que as barras de erro representam o intervalo entre o máximo e o mínimo valor de η . Na figura, é possível observar que o método *Second Order Upwind* apresentou uma pequena vantagem em relação aos demais, com os métodos *First Order Upwind* e *Power Law* apresentando médias de η aproximadamente 15 % e 10 % inferiores,

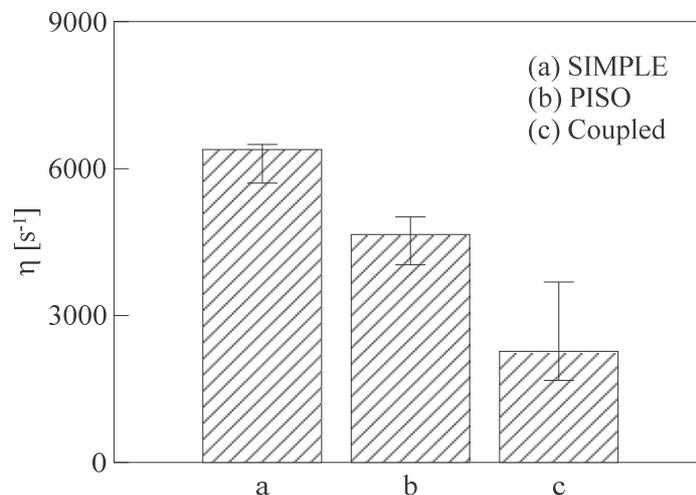
respectivamente. Vale ressaltar também que o método *First Order Upwind* apresentou maior amplitude de η , refletindo as variações na estabilidade de convergência que foram observadas ao longo da simulação.

Figura 8.11 – Taxa de resolução para os métodos de discretização testados no processo de solidificação.



Em relação aos métodos de acoplamento pressão-velocidade, na Figura 8.12 pode-se observar que o melhor desempenho foi alcançado com o método SIMPLE em comparação com os métodos PISO e *Coupled*. A magnitude da diferença entre os valores máximo e mínimo de η foi semelhante com os métodos SIMPLE e PISO, enquanto o método *Coupled* apresentou uma variação bastante significativa entre os valores máximo e mínimo de η .

Figura 8.12 – Taxa de resolução para os métodos de acoplamento pressão-velocidade testados no processo de solidificação.



Para os casos de solidificação com o método VVM, o valor médio de η foi de aproximadamente 1300 s^{-1} , durante o período no qual as simulações apresentaram convergência. Portanto, em comparação com o método Darcy STM com a mesma malha, a taxa de resolução com o método VVM é aproximadamente 7 vezes menor. Já para o método misto o valor médio de η foi de aproximadamente 3900 s^{-1} , portanto 13% inferior à taxa de resolução para o método Darcy STM com a mesma configuração (PISO + *Second Order Upwind*) e com a mesma malha. No entanto, o uso de $dt = 0,001 \text{ s}$ para o método misto e $dt = 0,005 \text{ s}$ para o método Darcy STM significa um tempo total de simulação 5,7 vezes maior para o método misto.

8.2 RESULTADOS PARA O PROCESSO DE FUSÃO

Nesta Seção são apresentados resultados obtidos no processo de fusão, a exemplo do que foi apresentado na Seção 8.1 para o processo de solidificação. Inicialmente, são apresentados os resultados quantitativos e qualitativos de fração líquida, obtidos com os métodos Darcy STM, VVM e misto, em comparação com os resultados de Assis et al. (2007). Além destes, são apresentados resultados de fluxo de calor na parede da esfera, de modo a avaliar os efeitos das configurações de cada um dos métodos nos resultados. Em seguida, são apresentados resultados adicionais das configurações numéricas, que contemplam a modelagem da parede da esfera, testes dos métodos de discretização e acoplamento pressão-velocidade e desempenho das simulações. Na parte final, são apresentados os resultados relativos às variáveis da camada líquida no processo de fusão.

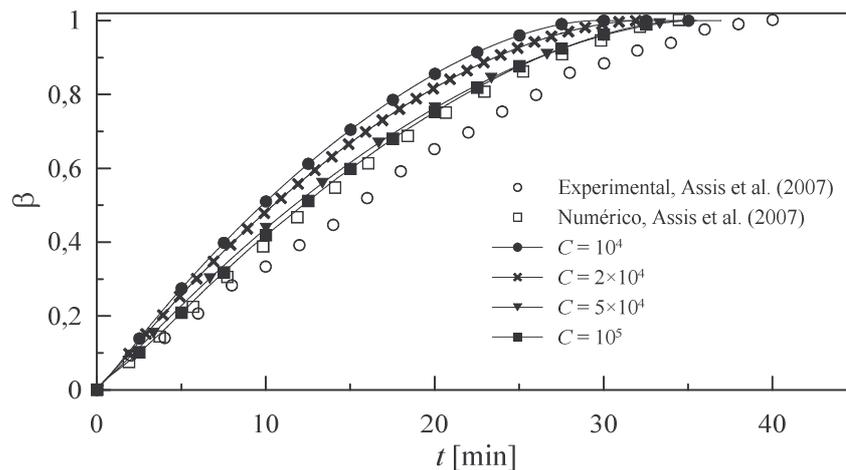
8.2.1 Testes dos modelos de mudança de fase

Os testes dos modelos de mudança de fase aplicados ao processo de fusão são os casos apresentados na Tabela 7.3. Os resultados são inicialmente analisados para cada um dos métodos testados de maneira individual. Por fim, o caso que produziu os resultados mais condizentes com os de Assis et al. (2007) com cada método testado foi selecionado para realizar a comparação dos métodos.

8.2.1.1 Método Darcy STM

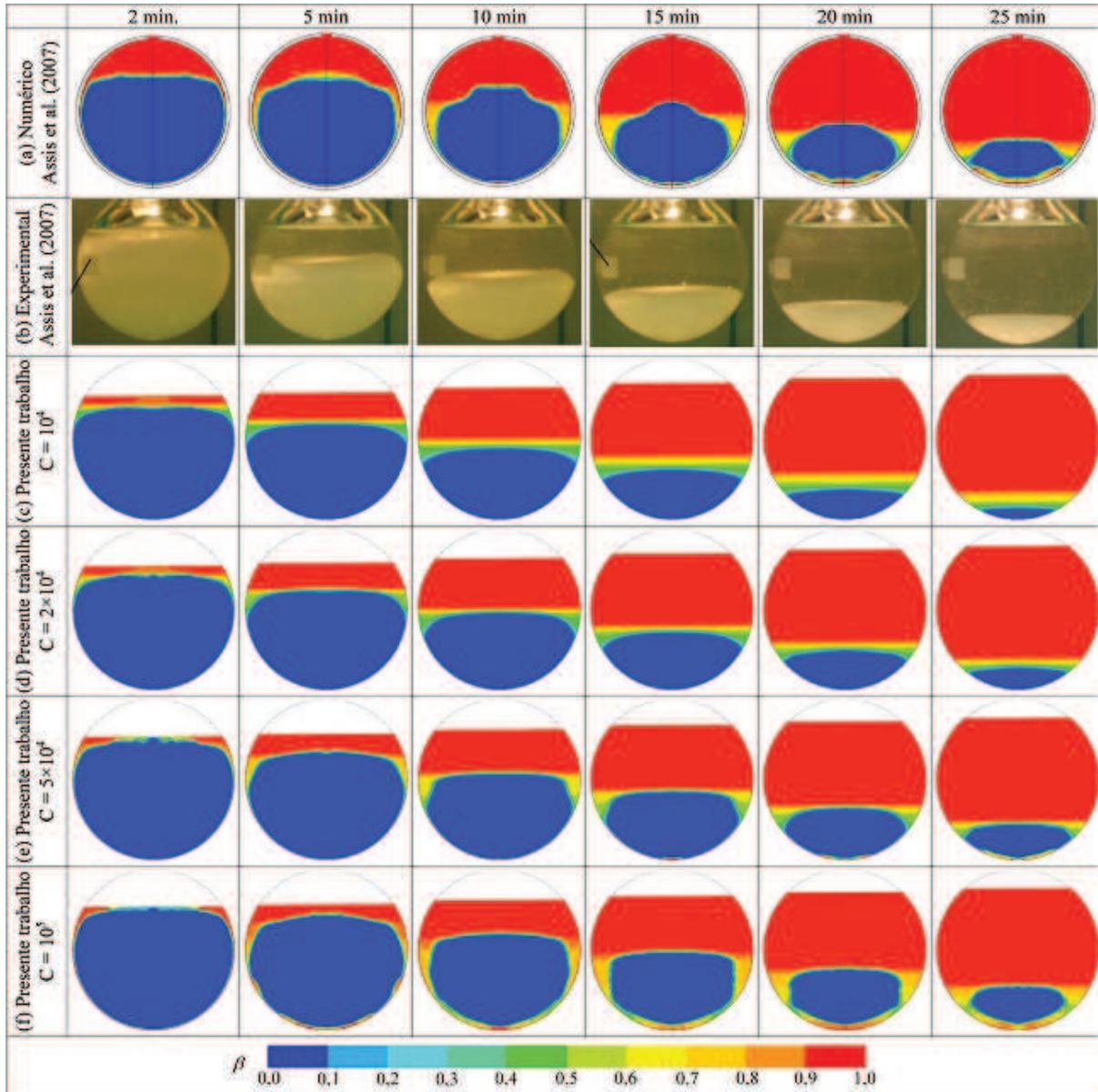
Os testes realizados com o método Darcy STM utilizaram $dt = 0,005$ s, com a malha 2-A, de 3918 elementos, com $C = 10^4$, 2×10^4 , 5×10^4 e 10^5 . Na Figura 8.13 são mostrados perfis de fração líquida para diversos valores de C , em comparação com os resultados experimentais e numéricos de Assis et al. (2007). A partir destes resultados, é possível verificar que os maiores valores de C produzem resultados mais próximos dos experimentais para a fração líquida, enquanto para os menores valores de C , o processo de fusão é concluído em um menor intervalo de tempo. Vale ressaltar que o Caso com $C = 2 \times 10^4$ apresentou maior dificuldade de convergência em relação aos demais valores testados.

Figura 8.13 – Fração líquida ao longo do tempo para diferentes valores de C no presente trabalho e nos resultados de Assis et al. (2007).



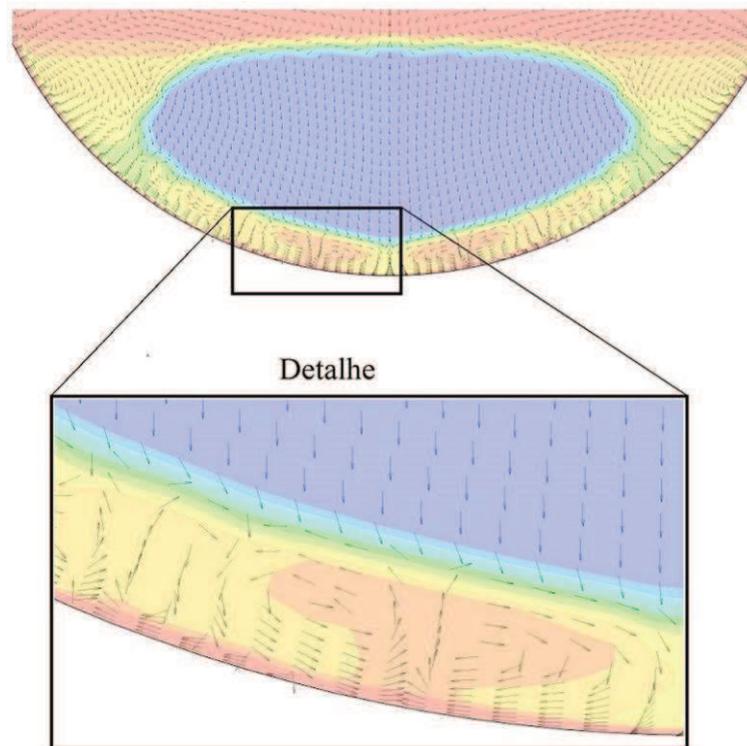
Na Figura 8.14 são mostrados os campos de fração líquida para diversos valores de C , em comparação com os resultados experimentais e numéricos de Assis et al. (2007). Nesta figura pode-se observar que os campos de fração líquida dos Casos com valores de C mais elevados mostram discrepância com as imagens dos resultados experimentais, portanto a tendência é contrária à dos resultados quantitativos. Nas imagens, é possível observar que o formato do sólido nos resultados numéricos do presente trabalho se assemelha mais aos resultados experimentais de Assis et al. (2007) (Figura 8.14(b)) para $C = 10^4$ (Figura 8.14(c)) e $C = 2 \times 10^4$ (Figura 8.14(d)). No entanto, estes valores de C proporcionam tempos de fusão menores que os demais. Para os casos com $C = 5 \times 10^4$ (Figura 8.14(d)) e $C = 10^5$ (Figura 8.14(e)), ocorre a formação de ondulações na região inferior do sólido que não ocorrem nos resultados experimentais.

Figura 8.14 - Campos de fração líquida na fusão de RT27 do presente trabalho com $C = 10^4$ à 10^5 e resultados numéricos e experimentais de Assis et al. (2007), para $t = 2, 5, 10, 15, 20$ e 25 min.



A formação das ondulações, citadas anteriormente, para os casos com valores mais elevados de C , assemelha-se às ondulações decorrentes da convecção natural abaixo do sólido, observadas experimentalmente com o sólido fixo (Tan, 2008). Esta característica pode ser melhor observada na Figura 8.15, a qual mostra vetores de velocidade sobrepostos com os campos de fração líquida para o caso com $C = 10^5$ e $t = 25$ min. É importante salientar que os vetores mostrados são normalizados com a mesma dimensão, uma vez que o valor da velocidade é muito baixo nesta região.

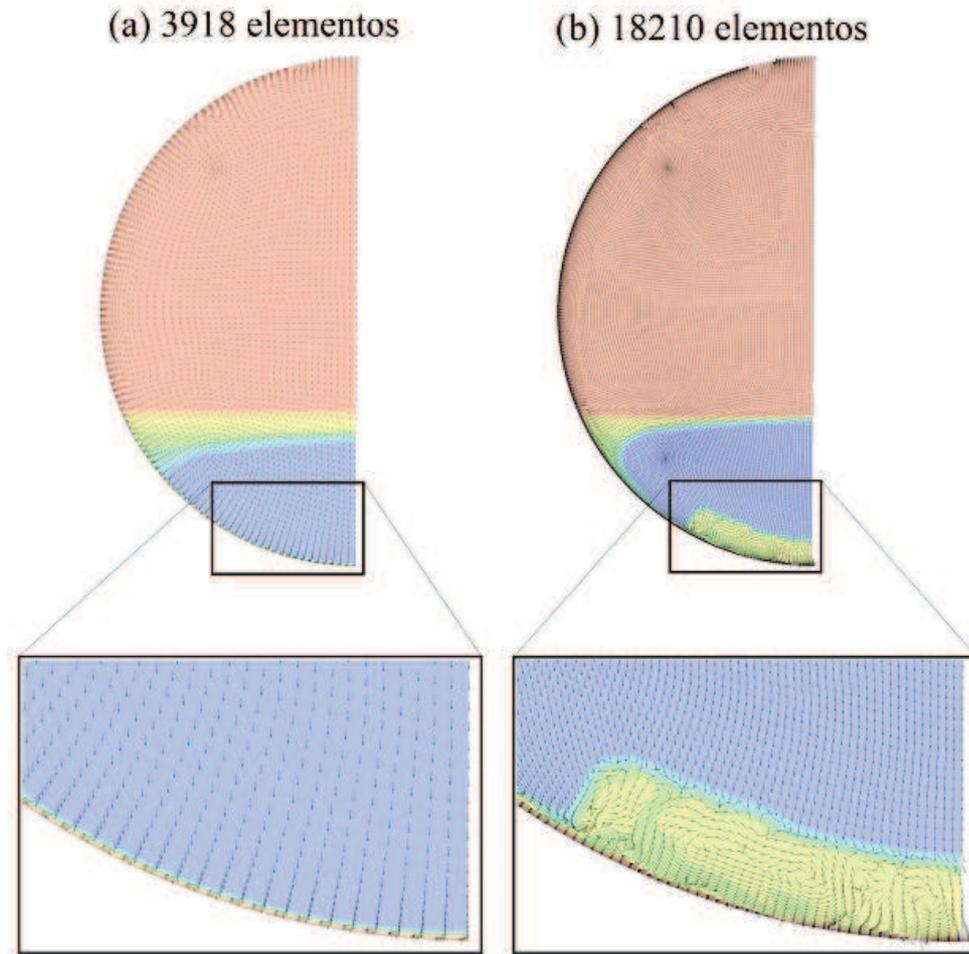
Figura 8.15 – Campos de fração líquida e vetores de velocidade para $C = 10^5$ e $t = 25$ min.



De modo a verificar se o surgimento das recirculações na região inferior é influenciado pela malha, foi executada uma simulação utilizando a malha 4-B, com maior refino junto da parede. Este teste foi realizado com $C = 2 \times 10^4$, por ser o maior valor a não produzir tal efeito nos testes realizados nas malhas com menor número de elementos. Embora os dois casos apresentem valores de fração líquida semelhantes, com diferenças abaixo de 1% durante todo o processo, os campos de fração líquida mostram diferenças significativas. Na Figura 8.16 são mostrados vetores de velocidade sobrepostos com os campos de fração líquida para as malhas 2-A, com 3918 elementos (Figura 8.16(a)) e 4-B, com 18210 elementos (Figura 8.16(b)) com $C = 2 \times 10^4$ em $t = 20$ min. No detalhe destacado para o caso de maior refino (Figura 8.16(b)), são observados vetores de velocidade com padrões de recirculação semelhantes aos da Figura 8.15 na região inferior do sólido. Na malha com menor número de elementos (Figura 8.16(a)), a espessura da camada completamente líquida ($\beta > 0,9$) abaixo do sólido ocupa menos de 2 elementos, com a camada de transição ($0,1 < \beta < 0,9$) ocupando 3 elementos. Já para a malha mais refinada (Figura 8.16(b)), a camada completamente líquida na região fora das recirculações ocupa 5 elementos e a camada de transição na mesma região ocupa 8 elementos. Desta forma, é possível concluir que, para o

método Darcy STM, o maior refino da malha junto da parede da esfera não proporciona melhoria nos resultados qualitativos.

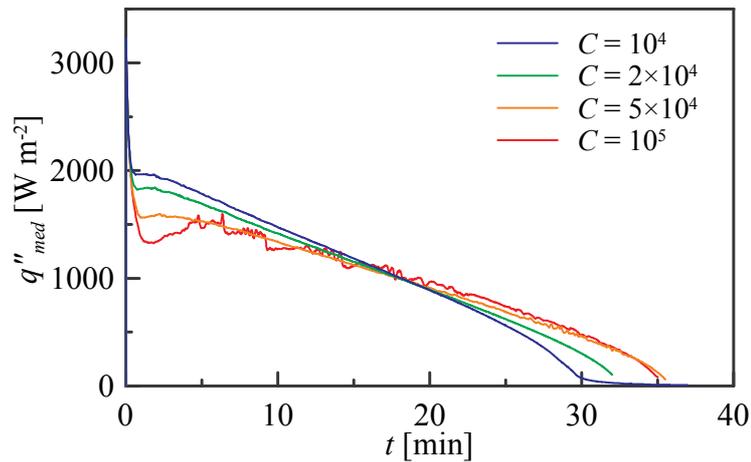
Figura 8.16 – Campos de fração líquida e vetores de velocidade com $C = 2 \times 10^4$ em $t = 20$ min para as malhas de: (a) 3918 elementos e (b) 18210 elementos.



A Figura 8.17 apresenta perfis transientes de fluxo de calor médio na parede da esfera (q''_{med}) para os valores de C utilizados com o método de Darcy STM. Como pode ser observado, o fluxo de calor médio na parede da esfera apresenta diferenças significativas entre os diferentes valores de C . Pode-se observar também que o pico de fluxo de calor ocorre durante os instantes iniciais do processo, com q''_{med} acima de 3 kW/m^2 para todos os valores de C . No entanto, o aumento de C provoca uma redução mais intensa de q''_{med} após o pico inicial em comparação com os menores valores de C . Para os casos com $C = 2 \times 10^4$ e 5×10^4 , após esta redução inicial acentuada, ocorre um período com fluxo de calor aproximadamente constante seguido por um decréscimo linear durante a maior parte do processo. No caso com $C = 10^5$, ocorre um aumento de q''_{med} em aproximadamente 4 min e oscilações ao longo do

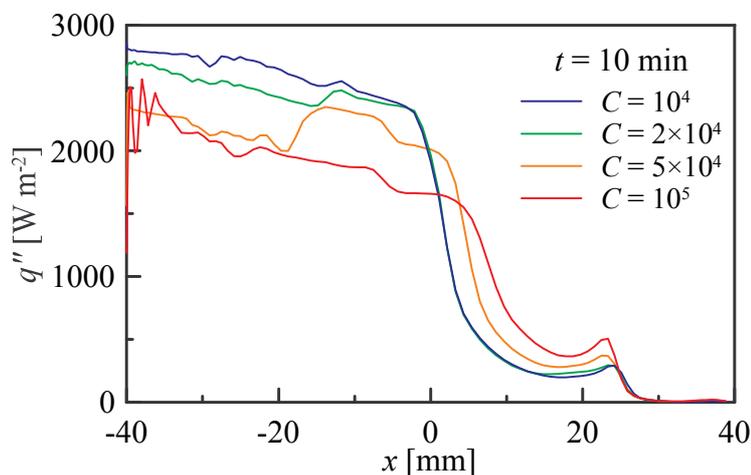
restante do processo. Nos instantes finais, a redução no fluxo de calor que indica o término do processo de fusão condiz com o instante em que β atinge 1, ou seja, em menor intervalo de tempo para os valores de C menores.

Figura 8.17 – Fluxo de calor médio na parede ao longo do tempo, para os valores de C testados no método Darcy STM.



Os efeitos de C também são percebidos no fluxo de calor local ao longo da parede da esfera. Conforme mostrado no exemplo da Figura 8.18 para $t = 10$ min, valores menores de C proporcionam fluxos de calor mais elevados na região da camada líquida. Para os valores mais elevados de C , surgem oscilações no fluxo de calor na região inferior da esfera, representada pelos menores valores de x , como no caso com $C = 10^5$. Estas oscilações no fluxo de calor coincidem em posição com as regiões de recirculação na parte inferior da esfera, conforme já observado na Figura 8.15.

Figura 8.18 – Fluxo de calor ao longo da parede da esfera no processo de solidificação em $t = 10$ min para os valores de C testados no método Darcy STM.

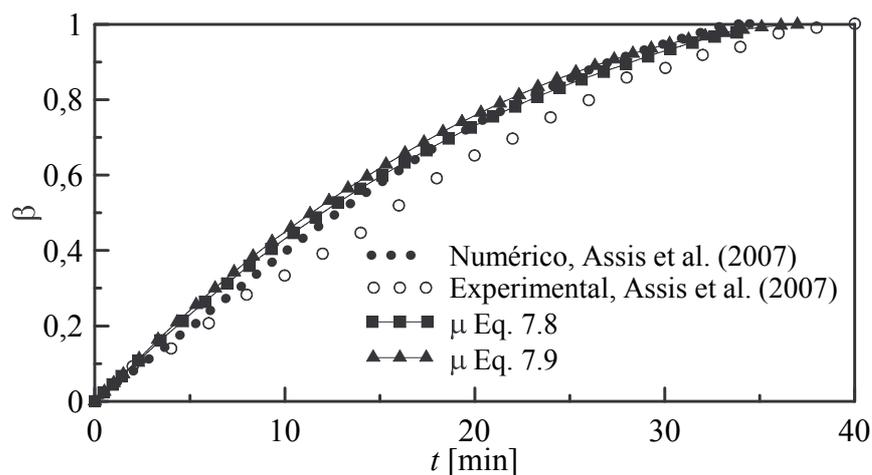


A partir dos resultados obtidos com o método Darcy STM, que são descritos nesta seção, é possível concluir que os resultados são fortemente influenciados pelo valor utilizado para a constante C . Esta influência indica uma limitação no grau de precisão dos resultados para o método Darcy STM quando aplicado ao processo de fusão de contato.

8.2.1.2 Método VVM

O método VVM apresentou maiores dificuldades de convergência em comparação com o método Darcy STM. Devido a estas dificuldades, as simulações com o método VVM foram executadas com $dt = 0,001$ s, além das alterações nos controles da simulação descritas na seção 7.4. A Figura 8.19 mostra perfis de β em função do tempo, obtidas por Assis et al. (2007) e com o presente trabalho, através das Eqs. (7.8) e (7.9). Ao comparar os resultados obtidos com as duas funções, é possível observar que ambas as funções produzem resultados próximos dos experimentais de Assis et al. (2007). No entanto, a simulação utilizando a Eq. (7.8) não foi finalizada, divergindo com aproximadamente 34 min, enquanto a simulação utilizando a Eq. (7.9) convergiu até o final do processo de fusão.

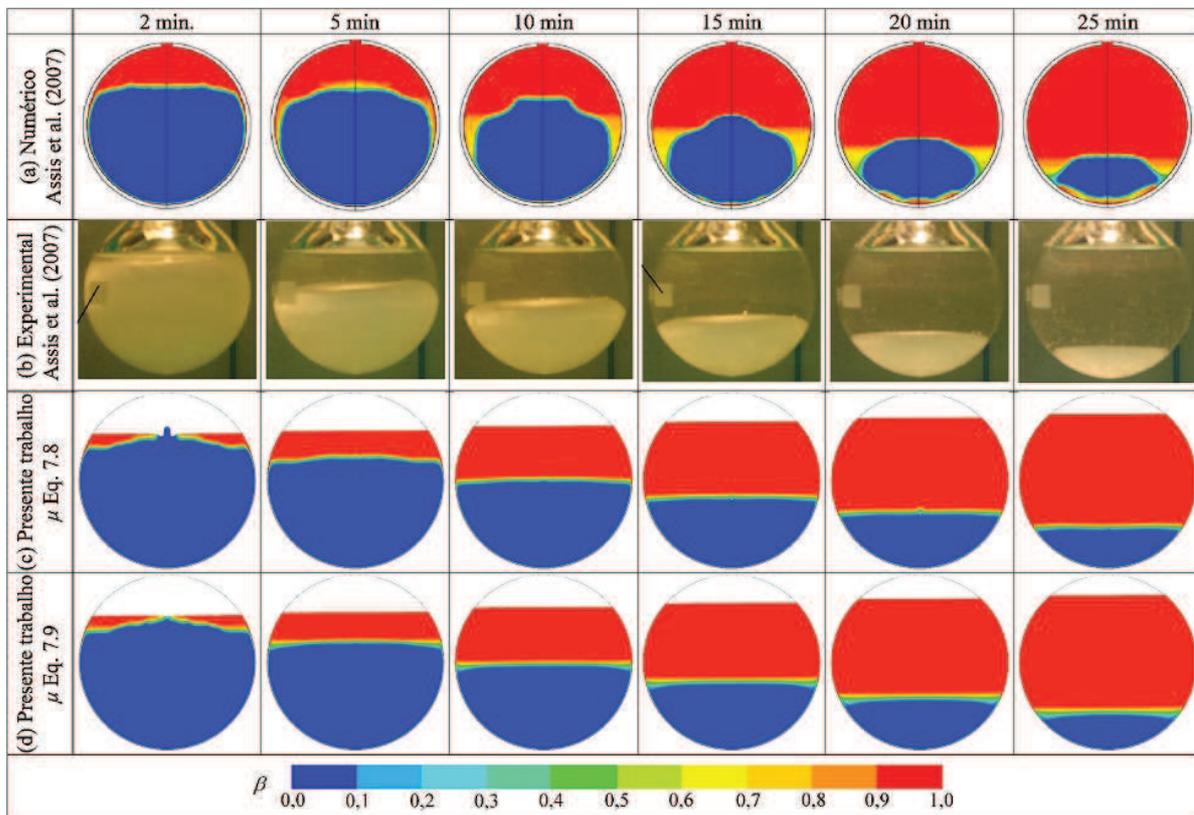
Figura 8.19 – Fração líquida ao longo do tempo no processo de fusão de RT27 para as funções testadas para descrever a viscosidade no método VVM.



Os campos de fração líquida obtidos com o método VVM apresentam significativa semelhança com os resultados experimentais de Assis et al. (2007). Na Figura 8.20, é possível observar que os resultados permanecem semelhantes aos experimentais ao longo do processo

para as duas funções testadas, sem a formação de recirculações na região inferior que ocorrem no método Darcy STM com valores maiores de C , mostradas na Figura 8.15. No entanto, nos instantes iniciais, ocorrem deformações na região superior do sólido, as quais não ocorrem na situação experimental. Estas deformações são visíveis em $t = 2$ min para as duas funções testadas, porém mais pronunciadas para o caso que utiliza a Eq. 7.8. No entanto, comparando-se todos os resultados numéricos, para determinado tempo, percebe-se que, aqueles obtidos por este trabalho, independentemente da função testada, apresentam melhor concordância com os resultados experimentais.

Figura 8.20 – Campos de fração líquida na fusão de RT27 do presente trabalho utilizando o método VVM com as duas funções testadas e resultados numéricos e experimentais de Assis et al. (2007), para $t = 2, 5, 10, 15, 20$ e 25 min

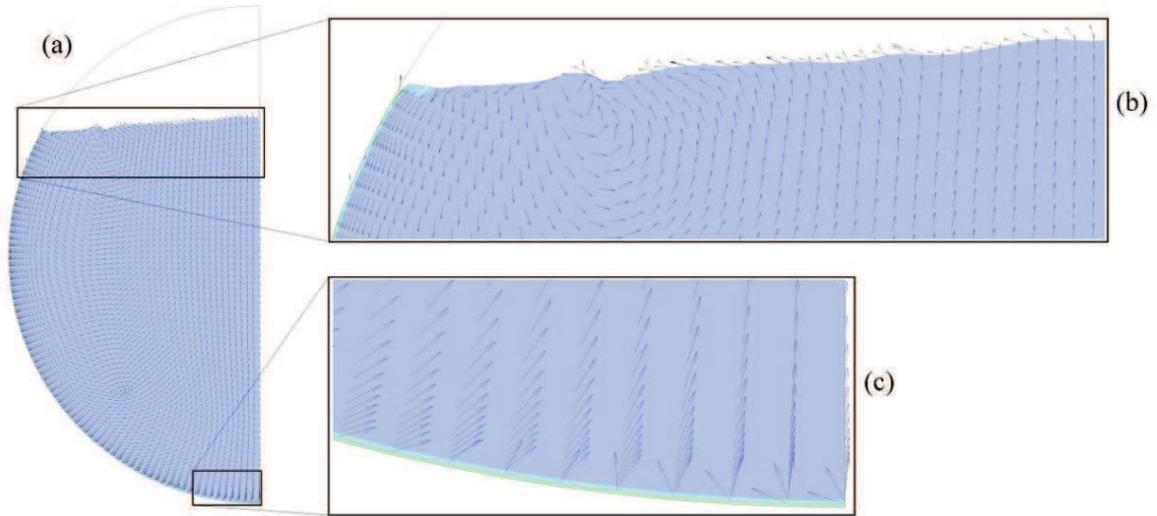


Além das deformações na região superior do sólido, mostradas na Figura 8.20(c), foram observadas maiores dificuldades de convergência nos instantes iniciais em comparação com o restante do processo. Portanto, foi necessária uma análise mais aprofundada dos resultados durante os instantes iniciais, de modo a identificar os diferentes processos que ocorrem e suas implicações na convergência da simulação. Após os instantes iniciais, foi verificada uma melhoria na convergência das simulações ao longo do tempo, com uma

proeminente redução no número de iterações necessárias após aproximadamente 3 min. Tal instante representa o período no qual a camada de líquido preenche toda a região acima do sólido, portanto a interface com o ar fica totalmente exposta ao PCM líquido e não mais ao sólido. Desta forma, é possível deduzir que uma parte considerável da dificuldade de convergência se deve ao acentuado gradiente de viscosidade presente na região da interface entre o ar e o PCM sólido. Esta dedução se justifica pela forma como o modelo multifásico determina a posição da interface, utilizando como base as velocidades dos dois fluidos. Existindo um gradiente acentuado de viscosidade nas células da região de interface, os cálculos empregados na determinação da posição da interface apresentam maior dificuldade de convergência (SAS IP, 2015), que é realçada pelas velocidades muito baixas presentes no PCM sólido. Após a formação da camada de líquido entre o sólido e o ar, o gradiente de viscosidade ocorre na interface sólido-líquido, na qual não são realizados os cálculos empregados no modelo multifásico para determinar a posição da interface. As dificuldades de convergência devido ao modelo multifásico são evidenciadas por oscilações temporais e espaciais nos campos de pressão na região de interface entre o ar e o PCM sólido.

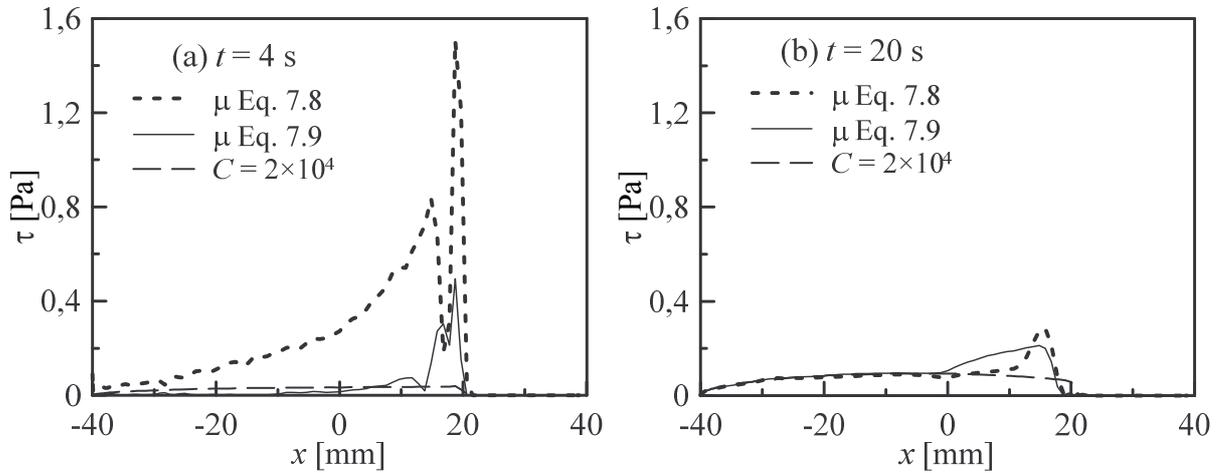
As deformações que ocorrem na região superior do sólido se devem ao início da formação da camada líquida junto da parede. Na Figura 8.21 são sobrepostos os vetores de velocidade com os campos de fração líquida para $t = 4$ s, para o caso que utiliza a Eq. 7.9 para descrever a viscosidade. No instante mostrado, a formação da camada líquida está nas etapas iniciais, porém, já é possível observar algumas distorções na região superior do sólido (Figura 8.21(b)), mesmo sem a presença de uma camada líquida identificável na escala do domínio todo (Figura 8.21(a)). Como a massa específica do PCM é menor na fase líquida, a expansão que ocorre no início da formação da camada líquida, junto da parede, provoca o deslocamento do sólido a partir da parede, principalmente na região inferior, conforme mostram os vetores de velocidade na Figura 8.21(c). O deslocamento ascendente é contido na região da interface ar-PCM, que fica em contato com a parede da esfera, enquanto continua na região do eixo de simetria. Desta forma, o deslocamento do sólido se torna descendente junto da parede e ascendente na região central. No entanto, as velocidades são muito baixas, da ordem de 10^{-5} m s^{-1} na região sólida.

Figura 8.21 – Campos de fração líquida e vetores de velocidade normalizados na fusão de RT27 com $D = 80$ mm e $t = 4$ s utilizando o método VVM com a Eq. 7.9: (a) todo o domínio, (b) detalhe da região superior e (c) detalhe da região inferior.



A contenção do sólido, citada anteriormente, causa um aumento da tensão de cisalhamento junto da parede na região da interface ar-PCM nos instantes iniciais da formação da camada líquida. Na Figura 8.22 são mostrados perfis de tensão de cisalhamento na parede da esfera em função da posição no eixo x para $t = 4$ s (Figura 8.22(a)) e para $t = 20$ s (Figura 8.22(b)), para os casos com as duas funções utilizadas no método VVM e para $C = 2 \times 10^4$ no método Darcy-STM. Na Figura 8.22(a) observa-se alguns picos de tensão na região de interface ar-PCM, mas estes somente ocorrem para os casos VVM. O pico de tensão de cisalhamento é reduzido ao longo do tempo para ambas as funções que descrevem a viscosidade, conforme mostrado na Figura 8.22(b), para $t = 20$ s. Esta redução continua ao longo do tempo, até que o perfil destes se torne equivalente ao perfil do caso com $C = 2 \times 10^4$ com $t = 120$ s, quando a camada líquida se torna estável em torno do sólido.

Figura 8.22 – Tensão de cisalhamento em função da posição no eixo x na parede da esfera para $C = 2 \times 10^4$ e para as duas funções testadas no método VVM para: (a) $t = 4$ s e (b) $t = 20$ s.



Em condições reais, as deformações na região superior do PCM sólido, citadas anteriormente e mostradas na Figura 8.21, não são observadas, uma vez que o material da esfera sofre expansão térmica com o aumento da temperatura e deformação elástica com os esforços da expansão do PCM no seu interior. Devido à impossibilidade de modelar estes efeitos, foram testadas duas medidas alternativas para mitigar os efeitos de deformação do sólido em função da contenção do mesmo junto da parede na interface ar-PCM. No primeiro teste, a massa específica do PCM foi considerada constante até T_m . Desta forma, a variação da massa específica ocorre em um intervalo de temperatura menor ($T_m \leq T \leq T_l$), no qual a viscosidade assume valores próximos de μ_l . No segundo teste, a parede da esfera foi incluída no domínio computacional, permitindo a condução de calor a partir da região superior. A parede da esfera em contato com o ar aquece em menor tempo que o restante da parede devido ao menor calor específico e menor massa específica do ar. Desta forma, o processo de fusão na região da interface ar-PCM inicia em um instante anterior ao restante da região em contato com a parede.

Como as deformações do sólido ocorrem na interface ar-PCM, foram realizados testes da influência das configurações do modelo multifásico nos resultados e na convergência das simulações. Os parâmetros de configuração alterados foram o limite de corte da fração volumétrica e a intensidade do tratamento anti-difusão entre os fluidos. O tratamento anti-difusão é aplicado nas células de interface entre os fluidos, de modo a reduzir difusão numérica que causa aumento da espessura da interface. A intensidade deste tratamento varia entre zero para intensidade mínima e 1 para intensidade máxima. Foram testados os valores de 0,7 e 1 para este parâmetro. Para o limite de corte da fração volumétrica, os valores foram:

10^{-4} , 10^{-6} , e 10^{-8} . Além destas configurações, foram obtidos os resultados de tensão de cisalhamento e interface ar-PCM no caso com a malha de maior refino (4-B), de modo a verificar se há influência da malha na tensão de cisalhamento no início do processo e nas deformações na região superior do sólido.

É importante salientar que parte dos testes foram realizados parcialmente, sendo que as simulações cujos resultados não são satisfatórios foram descontinuadas. Todos os parâmetros testados causaram algum efeito nos resultados e na convergência, conforme mostrado na Tabela 8.1. Apesar de todas as alterações descritas proporcionarem pequenas melhorias na convergência durante os instantes iniciais, as maiores diferenças foram observadas para a malha com maior refino e quando a parede é considerada no domínio computacional. Ao longo do processo, a convergência é melhorada e torna-se equivalente para as diferentes configurações. No entanto, mesmo no caso com todos os parâmetros de melhoria combinados, é necessário maior número de iterações para alcançar os critérios de convergência em comparação com o método Darcy-STM.

Tabela 8.1 – Efeitos dos parâmetros testados na convergência, na tensão máxima de cisalhamento e na deformação do PCM sólido na interface com o ar.

Parâmetro alterado	Efeitos			
	Convergência no início do processo	Pico de tensão de cisalhamento	Deformação do sólido na interface	Oscilação de pressão na interface
ρ constante para $T \leq T_m$	Melhoria	Redução	Pequeno aumento	Pequena redução
Aumento do limite de corte de γ	Pequena melhoria	Pequena redução	Redução	Pequena redução
Maior intensidade no tratamento anti-difusão	Melhoria	Sem alteração significativa	Redução	Sem alteração significativa
Parede considerada na malha	Melhoria	Aumento significativo	Redução	Pequeno aumento
Refino da malha	Melhoria	Redução	Redução significativa	Redução

Os ajustes testados no método VVM proporcionam pequenas variações na fração líquida e no fluxo de calor médio na parede. Estas variações permanecem abaixo de 5 % para a fração líquida e de 8% para o fluxo de calor. Vale ressaltar que os resultados são mais próximos entre si quando utilizados limites de corte de γ_k maiores.

8.2.1.3 Método misto

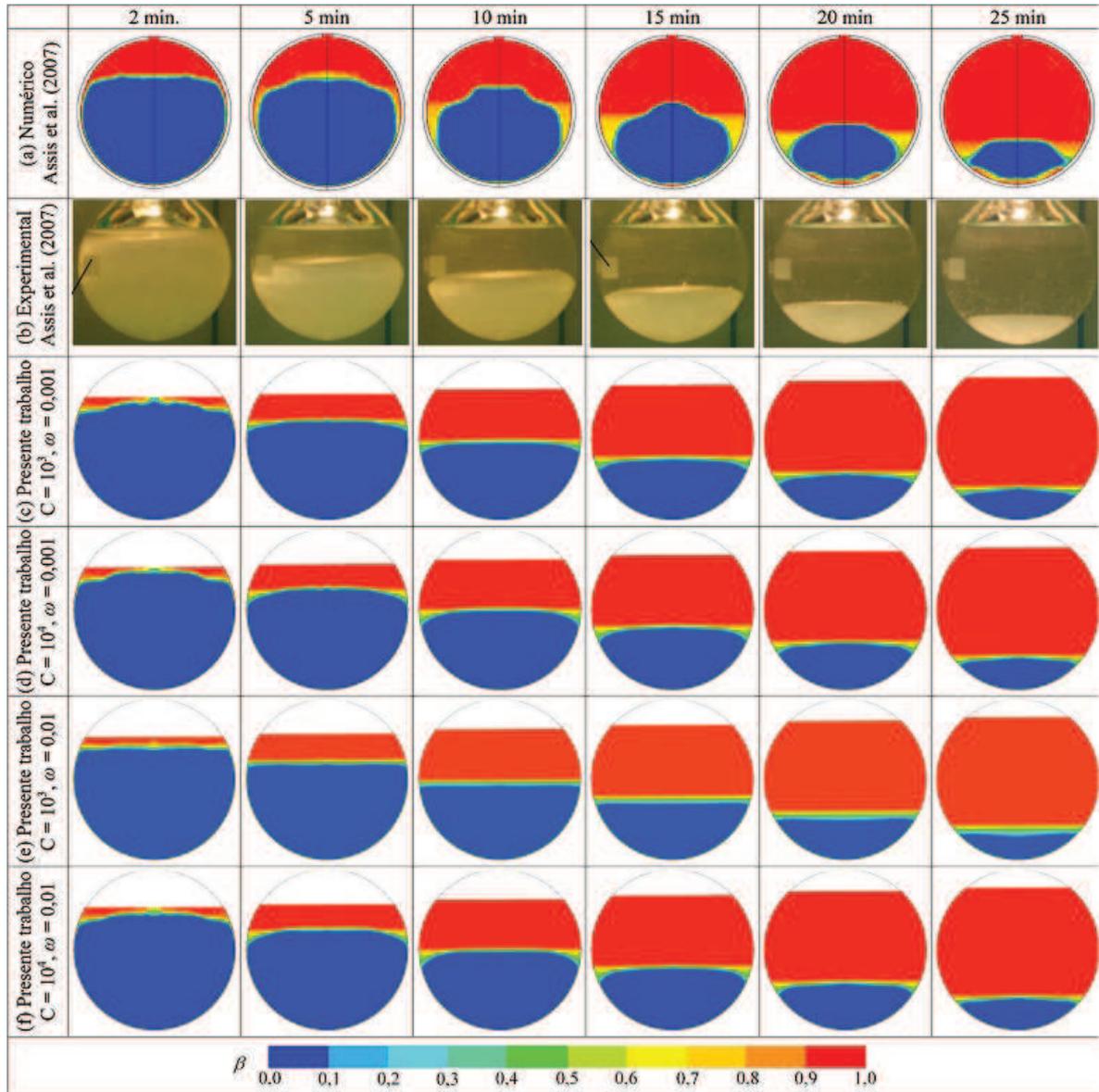
O método misto, que combina VVM e Darcy STM, foi testado com o objetivo de reduzir o custo computacional das simulações em relação ao método VVM, reduzindo a interferência causada pela constante C nos resultados, que foi observada no método Darcy STM. O critério utilizado para selecionar os valores de C foi que os mesmos permanecessem abaixo dos que causam problemas de recirculação na região inferior do sólido. Quanto à viscosidade, foram testadas inicialmente duas abordagens: variação linear em função da temperatura e a Eq. (7.9). No entanto, a abordagem com variação linear não possibilitou convergência quando utilizados valores de viscosidade máxima semelhantes aos utilizados com a Eq. (7.9). Portanto, a variação linear da viscosidade foi desconsiderada, sendo utilizada somente a Eq. (7.9) com dois valores de ω (0,01 e 0,001) para cada valor de C (10^3 e 10^4).

Quanto à convergência da simulação, o método misto apresentou comportamento semelhante ao VVM, com pequena melhoria na convergência no início do processo para os casos com $\omega = 0,01$. Mesmo assim, o método misto não representou ganhos significativos no custo computacional em comparação ao VVM. O tempo de fusão é semelhante para todos os casos testados com o método misto, com os casos que utilizam $C = 10^4$ necessitando em média 1,5% mais tempo para completar o processo em comparação com $C = 10^3$. Esta semelhança se reflete na fração líquida ao longo do tempo, com valores de fração líquida bastante próximos ao longo de todo o processo para as 4 combinações testadas.

Na Figura 8.23 são mostrados os campos de fração líquida para o método misto em comparação com os resultados numéricos e experimentais de Assis et al. (2007). Nas imagens, é possível observar que os campos de fração líquida são semelhantes entre si para todos os casos com o método misto, sendo observado um aumento na espessura da região de transição nos instantes finais para os casos com $C = 10^3$. Em relação aos efeitos de ω , o principal efeito observado é o formato mais plano na região superior do sólido para $\omega = 0,01$ (Figura 8.23(c) e (e)). Em comparação com as imagens do estudo experimental de Assis et al. (2007), é possível observar que o formato do sólido é mais semelhante nos casos com $C = 10^4$

(Figura 8.23(d) e (f)). Da mesma forma, os casos com $C = 10^4$ apresentam valores de fração líquida mais próximos aos resultados experimentais de Assis et al. (2007) ao longo do processo.

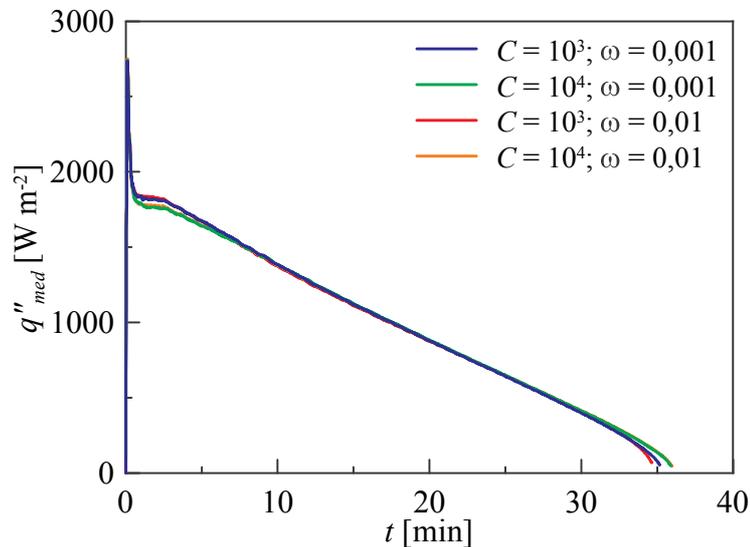
Figura 8.23 – Campos de fração líquida na fusão de RT27 do presente trabalho utilizando o método misto e resultados numéricos e experimentais de Assis et al. (2007), para $t = 2, 5, 10, 15, 20$ e 25 min



As semelhanças observadas na fração líquida para o método misto também se refletem no fluxo de calor na parede da esfera. O fluxo de calor local apresenta valores semelhantes para todos os casos, com valores maiores na região da camada líquida e uma redução significativa na região de interface entre o ar e o PCM. A Figura 8.24 mostra o fluxo de calor

médio ao longo do tempo, na qual é possível observar observadas pequenas diferenças entre os casos com $C = 10^3$ e 10^4 no início do processo, refletindo os efeitos da constante C observados no método Darcy STM. O aumento de C provoca uma redução mais acentuada no fluxo de calor nos instantes iniciais durante a formação da camada líquida, seguida por um período maior com fluxo de calor aproximadamente constante. Em relação aos efeitos de ω no fluxo de calor médio, foram observadas oscilações de pequena amplitude no início do processo para os casos com $\omega = 0,001$, condizendo com a maior dificuldade de convergência desta configuração em comparação com os casos com $\omega = 0,01$.

Figura 8.24 – Fluxo de calor médio ao longo do tempo no processo de fusão para os casos com o método misto.

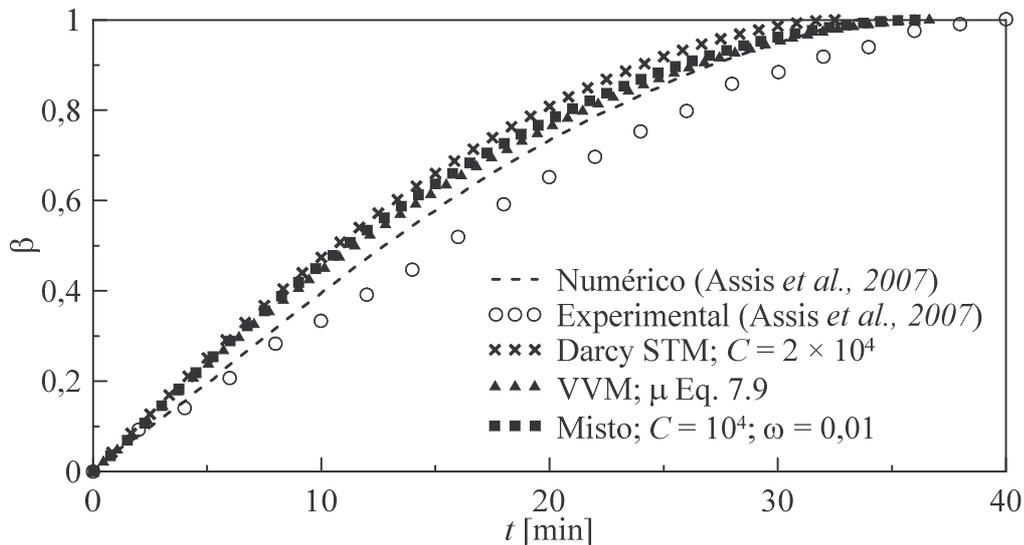


8.2.1.4 Comparação dos métodos testados

Entre os métodos testados no processo de fusão, foi selecionada para cada método, a configuração que apresentou os melhores resultados na combinação entre quantitativos e qualitativos, em comparação com o estudo de Assis et al. (2007). Estas configurações são: Darcy STM com $C = 2 \times 10^4$, VVM com a Eq. (7.9) e misto com $C = 10^4$ e $\omega = 0,01$. A Figura 8.25 mostra os resultados quantitativos de fração líquida ao longo do tempo, onde é possível observar que o método VVM é o que apresenta os resultados mais próximos aos experimentais de Assis et al. (2007), com diferença de 13,5% no tempo necessário para alcançar $\beta = 0,95$. O método Darcy STM produziu resultados mais distantes dos experimentais, apresentando fusão mais rápida que os demais métodos, com diferença de

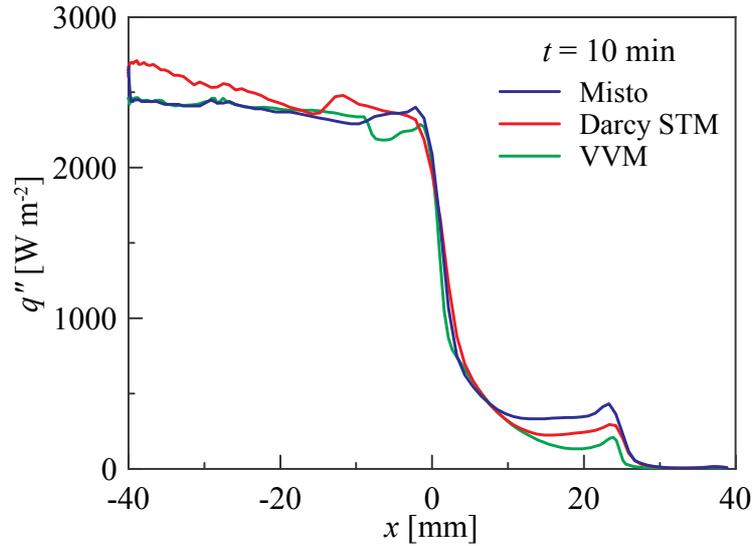
21,9% no tempo necessário para alcançar $\beta = 0,95$ em relação aos resultados experimentais de Assis et al. (2007). O método misto apresentou resultados intermediários, porém próximos aos do método VVM, representando uma diferença de 17,5% no tempo para alcançar $\beta = 0,95$ em comparação com os resultados experimentais de Assis et al. (2007). De forma semelhante, o tempo de simulação apresenta a mesma tendência, com menor tempo computacional para o método Darcy STM, maior tempo computacional para o método VVM e tempo intermediário para o método misto. Para casos utilizando a mesma malha, o tempo computacional varia entre 7 e 35 dias para os métodos Darcy STM e VVM, respectivamente.

Figura 8.25 – Fração líquida ao longo do tempo para os resultados numéricos do presente trabalho com os métodos Darcy STM, VVM e misto e para os resultados experimentais e numéricos de Assis et al. (2007).



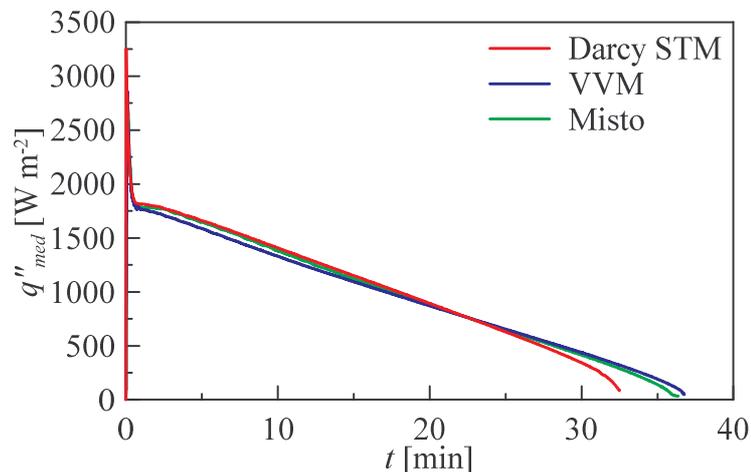
A Figura 8.26 mostra o fluxo de calor local ao longo da parede da esfera para $t = 10$ min. No gráfico, é possível observar que a queda acentuada no fluxo de calor, que coincide com a região de término da camada líquida, ocorre na mesma posição para os três métodos testados. Na região da camada líquida, representada pelo fluxo de calor mais elevado, os valores são semelhantes para os métodos VVM e misto, enquanto o método Darcy STM produz valores mais elevados. No entanto, são verificadas diferenças no fluxo de calor na região superior, onde o PCM se encontra na fase líquida.

Figura 8.26 – Fluxo de calor local para os métodos testados em $t = 10$ min.



O fluxo de calor médio ao longo do tempo é influenciado pela constante C para os métodos Darcy STM e misto. Na Figura 8.27, é possível observar que os resultados são próximos entre si nos instantes iniciais para os métodos Darcy STM e misto, com um breve período de fluxo de calor médio aproximadamente constante. Nos instantes finais do processo, o método misto apresenta resultados mais próximos do VVM, enquanto o método Darcy STM apresenta redução mais acentuada no fluxo de calor após 28 min em relação aos demais métodos. Para o método VVM, após o decréscimo inicial durante a formação da camada líquida, não ocorre o breve período com fluxo de calor médio aproximadamente constante, iniciando imediatamente o período com decréscimo linear no fluxo de calor até os instantes finais.

Figura 8.27 – Fluxo de calor médio ao longo do tempo no processo de fusão para os métodos testados.



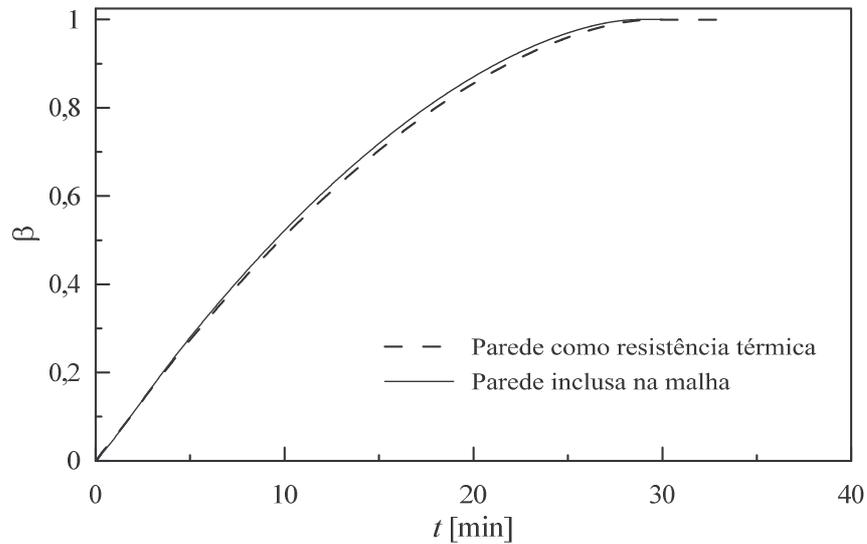
8.2.2 Testes das configurações numéricas

Para o processo de fusão, foi realizada uma verificação da influência da modelagem da parede da esfera, devido à espessura ser significativamente maior em relação ao processo de solidificação. Além desta verificação, foram testados também os métodos de discretização e acoplamento pressão-velocidade. Os testes de discretização temporal e espacial não foram realizados para o processo de fusão devido ao elevado tempo necessário para realização destes testes utilizando o método VVM ou misto. Já no caso do método Darcy STM, o refino da malha provocou desvio nos resultados, inviabilizando uma análise completa.

8.2.2.1 Verificação da modelagem da parede

A esfera analisada no processo de fusão possui parede com espessura de 2 mm, portanto, consideravelmente maior que no processo de solidificação. Foi realizada a simulação de um caso considerando a parede na malha de modo a comparar com a modelagem da parede como resistência térmica. A parede da esfera foi incluída como um domínio sólido adicional. Porém, mantendo a região interna com a mesma configuração, resultando na malha 2-B, derivada da 2-A. Este teste foi realizado utilizando o método Darcy-STM com $C = 10^4$, uma vez que esta configuração necessitou menor tempo de simulação. Os resultados de fração líquida ao longo do tempo para os dois casos são mostrados na Figura 8.28. No gráfico, é possível observar que a inclusão da parede no domínio computacional resulta em uma pequena redução no tempo total de fusão. Esta diferença se deve, principalmente, à condução de calor a partir da região superior, em contato com o ar, uma vez que esta porção aquece antes do restante do domínio devido ao menor calor específico do ar em comparação com o PCM. A diferença no valor da fração líquida entre as duas modelagens permanece menor que 3% ao longo da maior parte do processo.

Figura 8.28 – Fração líquida ao longo do tempo na fusão de RT27 considerando a parede da esfera como resistência térmica e considerando a parede da esfera na malha.



8.2.2.2 Testes dos métodos de discretização e acoplamento pressão-velocidade

Os testes dos métodos de discretização e acoplamento pressão-velocidade no caso da fusão com o método VVM não foi realizado de forma abrangente como no caso do processo de solidificação. Tais testes foram realizados de maneira parcial no início do processo, devido ao tempo necessário de processamento para completar todos os casos. Quanto ao acoplamento pressão-velocidade, a velocidade de convergência apresentou padrão semelhante ao caso da solidificação, com o método PISO necessitando menor número de iterações que o método SIMPLE. Com o método *Coupled*, não foi possível alcançar a convergência, porém foi possível observar que a tendência deste método é exigir maior tempo computacional também para a fusão, condizendo com o comportamento que ocorreu nos testes executados para a solidificação. Em termos de resultados, foi possível notar que os métodos SIMPLE e PISO produziram resultados de fração líquida bastante semelhantes durante os instantes iniciais. Desta forma, foi adotado o método PISO para as simulações por reduzir o tempo de processamento.

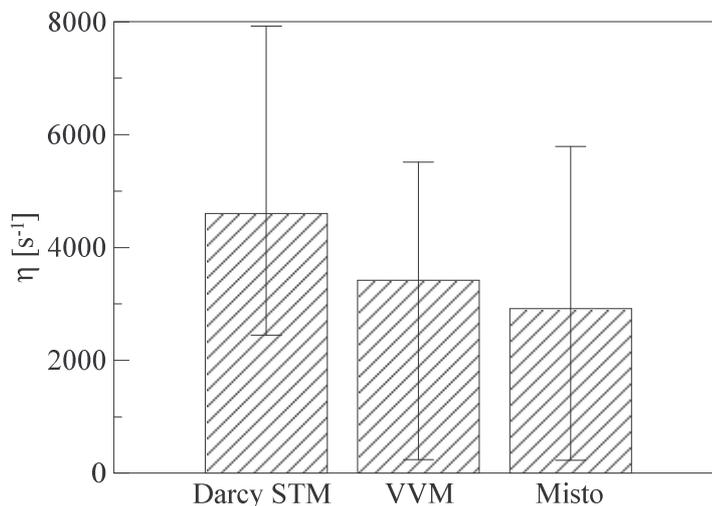
Entre os métodos de discretização da energia e da quantidade de movimento testados, a convergência é dificultada com o método *Power Law*. Para o método *First Order Upwind*, a convergência apresentou mais instabilidade que o *Second Order Upwind*, enquanto os resultados de fração líquida obtidos nos instantes iniciais para cada um dos métodos de

discretização foram semelhantes. Desta forma, foi adotado o método *Second Order Upwind*, já que a simulação se manteve mais estável com este método.

8.2.2.3 Desempenho das simulações

No processo de fusão, foi comparado o desempenho médio das simulações utilizando cada um dos três métodos testados. Nesta comparação, foram consideradas as simulações executadas em computadores com configuração semelhante (processador Intel Core i7 com frequência entre 3,2 e 3,5 GHz e memória a partir de 16 GB). A taxa de resolução média para cada método é mostrada na Figura 8.29, com as barras de erro representando o intervalo entre os valores máximos e mínimos de η . O método Darcy STM apresentou melhor desempenho, com η médio de 4600 s^{-1} . Já o método misto apresentou as taxas de resolução mais baixas, com média de aproximadamente 3000 s^{-1} , abaixo do resultado para o método VVM, que foi de aproximadamente 3400 s^{-1} . No entanto, o método misto apresentou maior amplitude entre os valores mínimo e máximo de η , com uma pequena diferença em relação ao VVM.

Figura 8.29 – Taxa de resolução média das simulações para o processo de fusão com os métodos Darcy STM, VVM e misto.



Os valores mínimos de η ocorrem no início do processo, sendo semelhantes para os métodos VVM e misto, com valores abaixo de 300 s^{-1} , enquanto o método Darcy STM apresenta valores mínimos de η acima de 2000 s^{-1} . Esta diferença se deve às maiores dificuldades de convergência observadas no início do processo para os métodos VVM e misto, que não ocorrem no método Darcy STM. Em relação às configurações do método

Darcy STM, o desempenho é semelhante para os valores de C testados, com η médio entre 4500 e 5000 s^{-1} para os casos com a malha 2-A. No entanto, no caso com $C = 2 \times 10^4$, o valor médio de η é reduzido para aproximadamente 3000 s^{-1} , condizendo com as dificuldades de convergência observadas durante a simulação.

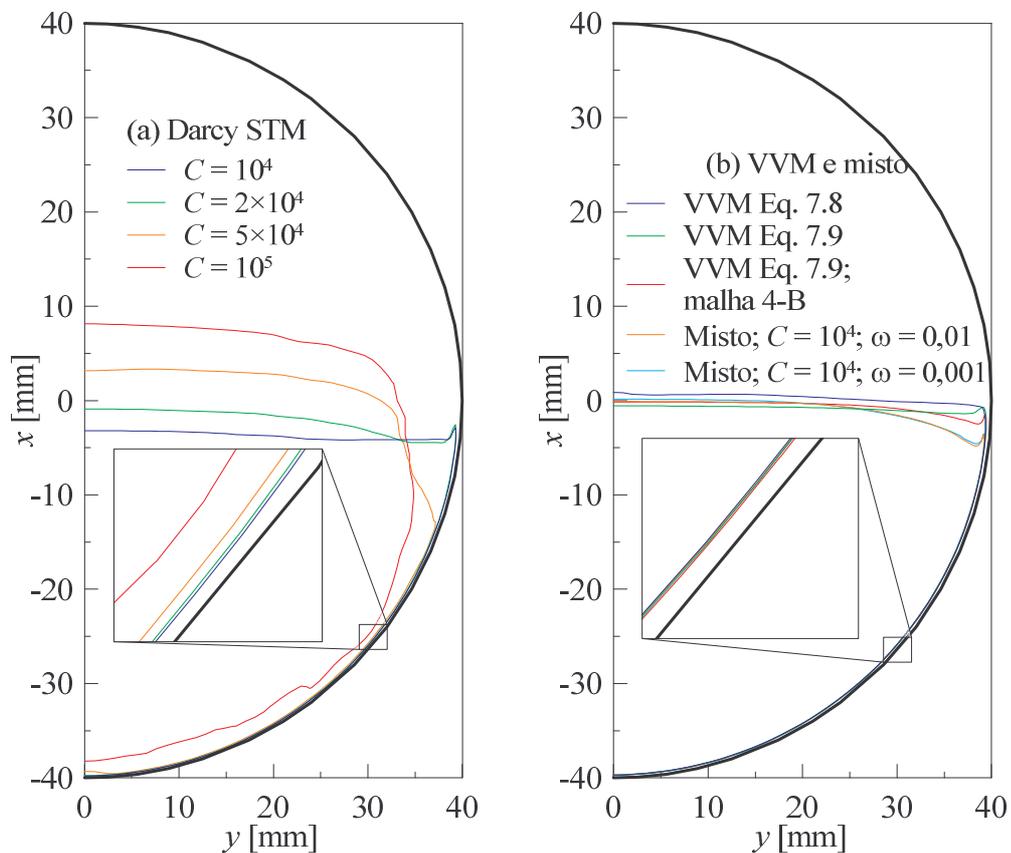
Para o método VVM, o valor médio de η varia entre 2600 e 3600 s^{-1} para as malhas com menos refino (2-A e 2-B). O refino da malha proporcionou melhoria no desempenho para o método VVM, aumentando o valor médio de η para aproximadamente 4000 s^{-1} com a malha 4-B. Neste mesmo caso, o valor mínimo de η foi superior a 500 s^{-1} no início do processo, representando uma melhoria mais significativa que no restante do processo. No entanto, os valores máximos de η foram semelhantes para as malhas de diferentes graus de refino, com aproximadamente 5000 s^{-1} nos instantes finais do processo. Já no método misto, os valores médios de η variam entre 2500 e 3200 s^{-1} para as malhas de menor grau de refino. Foi possível verificar maior influência de ω em comparação com C no desempenho das simulações, sendo o melhor desempenho apresentado pelo caso com $C = 10^4$ e $\omega = 0,01$. Os menores desempenhos ocorreram com valores menores de ω , evidenciando a dificuldade de convergência decorrente da viscosidade mais elevada. No início do processo, o desempenho das simulações com o método misto é bastante semelhante ao do método VVM, com η abaixo de 300 s^{-1} . Como a diferença de η médio é pequena entre os métodos VVM e misto com malhas semelhantes, é possível afirmar que o custo computacional de ambos é equivalente. Portanto, para uma mesma condição de malha e dt , os métodos VVM e misto necessitam de um tempo computacional semelhante.

8.2.3 Análise da camada líquida no processo de fusão de contato

Entre os modelos de mudança de fase que foram testados, o método Darcy STM apresentou maior influência na camada líquida, com o aumento de C provocando um aumento na espessura desta camada. Este aumento se deve à restrição no movimento descendente da porção sólida. Desta forma, os demais resultados obtidos para a camada líquida também são bastante afetados pelo aumento de C . Já no método VVM, as diferentes funções testadas e demais configurações produzem pouca variação no formato do sólido, principalmente na região da camada líquida. O formato do sólido ($\beta < 0,5$) é mostrado na Figura 8.30 para o método Darcy STM (Figura 8.30(a)) e para os métodos VVM e misto (Figura 8.30(b)), em $t = 10$ min. Além das diferenças mais pronunciadas no formato do sólido para o método

Darcy STM, é possível observar nos detalhes destacados a tendência de aumento da espessura da camada líquida com o aumento de C . Nos demais métodos, as variações nesta espessura são consideravelmente menores, mesmo quando comparadas as malhas de menor refino com a mais refinada. No entanto, a tendência de aumento da espessura da camada para valores maiores de C também é observado no método misto. Quanto ao formato do sólido na região superior, é possível observar que esta região é mais curvada para valores maiores de C , tanto no método Darcy STM quanto no misto. No caso de valores menores de C e do método VVM, a região superior do sólido possui formato aproximadamente plano.

Figura 8.30 – Formato do sólido em $t = 10$ min para as principais configurações dos modelos de mudança de fase testados: (a) Darcy STM; (b) VVM e misto.

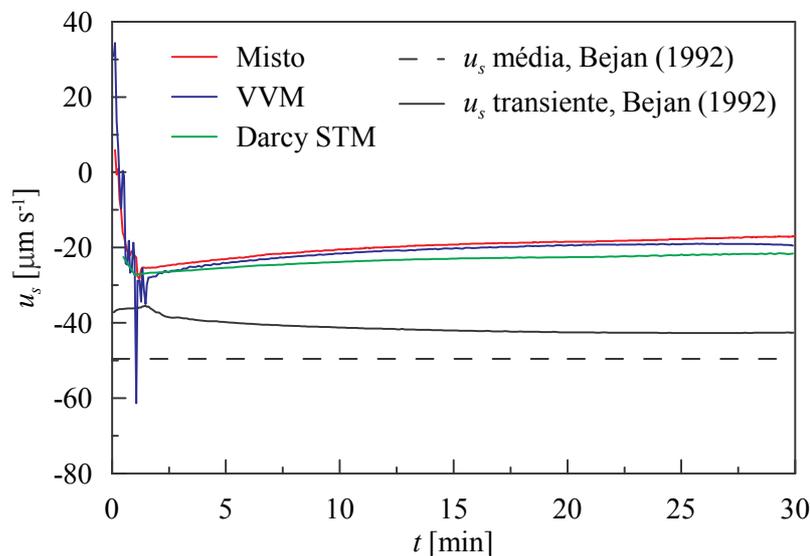


Nas seções 8.2.3.1 a 8.2.3.3 são comparados os resultados na camada líquida para os métodos testados, com enfoque na configuração de cada método que produziu a melhor combinação de resultados entre a fração líquida e os resultados específicos da camada líquida. Estas configurações são: Darcy STM com $C = 2 \times 10^4$; VVM com Eq. (7.9) e $\omega = 0,001$; misto com $C = 10^4$ e $\omega = 0,01$.

8.2.3.1 Velocidade da porção sólida

A velocidade descendente da porção sólida (u_s) é obtida diretamente nos resultados das simulações, sendo comparada com os resultados obtidos através da Eq. (7.26) (Bejan, 1992). Os resultados obtidos com as melhores configurações de cada método utilizando a malha 2-A e através da Eq. (7.26) são mostrados na Figura 8.31. É possível observar que os valores medidos são mais próximos de zero que os valores calculados, tanto na versão média quanto na transiente. No entanto, ao calcular o deslocamento total do sólido, através da integração dos valores de velocidade ao longo do tempo total do processo, os resultados obtidos com a Eq. (7.26) proporcionam deslocamentos maiores que o diâmetro da esfera, enquanto os resultados numéricos representam deslocamentos compatíveis com a altura do PCM sólido no início do processo. Tais diferenças podem ser atribuídas às características distintas de cada caso. Enquanto o presente estudo considera o processo de mudança de fase com propriedades contínuas e a esfera parcialmente preenchida, o estudo de Bejan (1992) considera o processo de mudança de fase isotérmico e a esfera totalmente preenchida.

Figura 8.31 – Velocidade da porção sólida ao longo do tempo para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da correlação de Bejan (1992).



Ainda em relação a Figura 8.31, pode-se observar que o perfil temporal da velocidade do sólido obtido através dos métodos Misto, VVM e Darcy STM são semelhantes entre si. No entanto, o método Darcy STM apresenta velocidades descendentes maiores que nos demais métodos. As velocidades maiores da porção sólida condizem com o menor tempo de fusão do método Darcy STM, conforme observado na Seção 8.2.1.4. Na Figura 8.31 também é possível

observar oscilações da velocidade do sólido no início do processo para os resultados dos métodos VVM e misto. Estas oscilações refletem as deformações observadas na porção sólida no início do processo, em função do início da formação da camada líquida, conforme mostrado na Seção 8.2.1.2. Já no caso do método Darcy STM, não ocorrem as oscilações, uma vez que o deslocamento do sólido é amortecido e as deformações nesta região não enfrentam a resistência imposta pela viscosidade elevada que existe nos demais métodos.

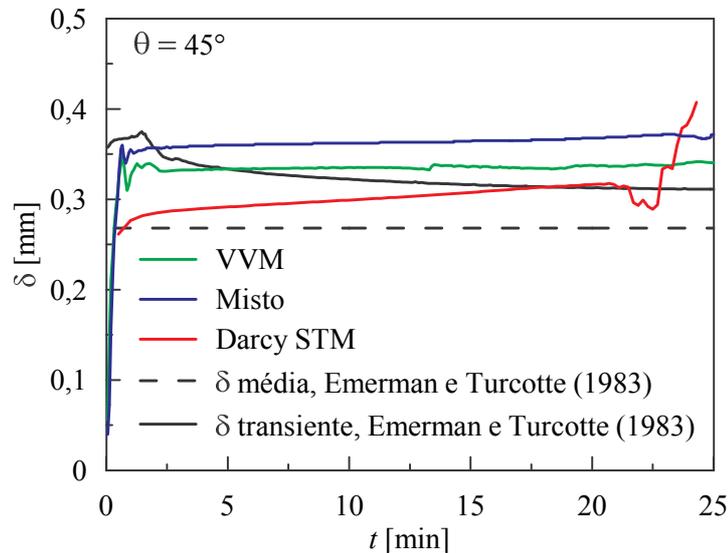
As duas funções testadas no método VVM produziram resultados semelhantes entre si, inclusive na amplitude das oscilações no início do processo. O caso com a malha mais refinada (4-B) produziu resultados semelhantes aos do caso com a malha 2-A, porém com menor quantidade de oscilações nos instantes iniciais, indicando uma melhoria nos resultados com o refino da malha. No método Darcy STM, ocorre um amortecimento no deslocamento da porção sólida, com o aumento no valor de C causando a redução de u_s . Os efeitos observados nos métodos Darcy STM e VVM ocorrem também no método misto, porém com intensidades diferentes. No método misto, o uso de valores maiores de C apresentou u_s menores, enquanto a amplitude das oscilações de u_s no início do processo são reduzidas com o uso de viscosidade menor no sólido.

8.2.3.2 Espessura da camada líquida

A Figura 8.32 mostra perfis da espessura da camada líquida (δ) ao longo do tempo, em $\theta = 45^\circ$, para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da Eq. (7.24). Nesta figura pode-se observar que os resultados obtidos numericamente para δ foram mais semelhantes aos obtidos com a versão transiente da Eq. (7.24), do estudo de Emerman e Turcotte (1983), em comparação com a versão média desta equação. Em relação aos métodos testados (VVM, misto e Darcy STM), pode-se observar que o método Darcy STM produziu espessuras menores ao longo do tempo, seguido do método VVM, com o método misto apresentando espessuras maiores. Também é possível observar que os métodos testados apresentam espessura acima do valor médio obtido com a Eq. (7.24). No entanto, em comparação com a versão transiente da Eq. (7.24), o modelo numérico que produz resultados mais próximos varia ao longo do tempo. Inicialmente, o método misto produz resultados mais semelhantes à versão transiente da Eq. (7.24) até aproximadamente 2 min. Após este período, a espessura obtida com o método VVM é mais próxima da versão transiente da Eq. (7.24). Após 10 min, os resultados obtidos com o método Darcy STM se assemelham aos obtidos

com a versão transiente da Eq. (7.24). As oscilações observadas na espessura obtida com o método Darcy STM após 20 min coincidem aos instantes nos quais a porção superior da camada líquida atinge a região de $\theta = 45^\circ$. No caso do método VVM, são observadas oscilações no início do processo, refletindo as variações observadas na velocidade descendente da porção sólida. Já para o método Darcy STM, não são observadas oscilações na espessura da camada líquida, condizendo com a função de amortecimento produzida pela constante C . Seguindo a mesma tendência de influência da constante C , o método misto apresenta oscilações nos instantes iniciais, porém de amplitude menor em relação aos resultados do método VVM.

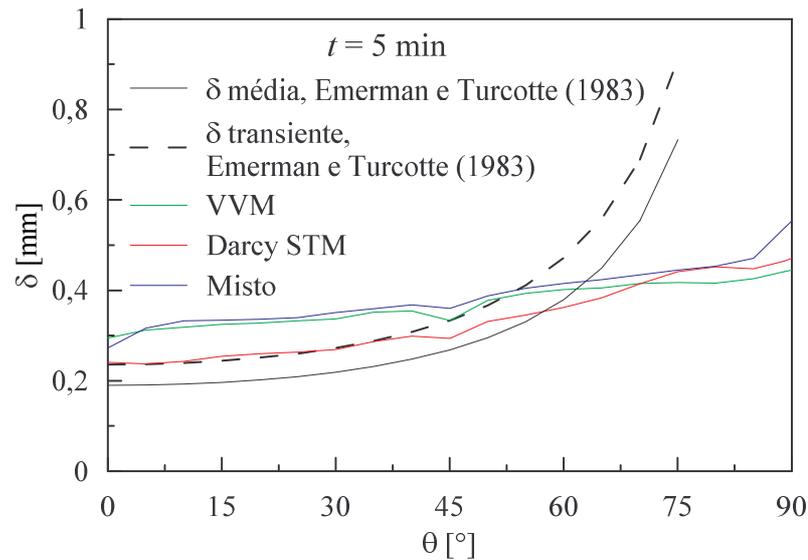
Figura 8.32 – Espessura da camada líquida ao longo do tempo em $\theta = 45^\circ$ para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da Eq. (7.24).



Nos casos com o método Darcy STM, a espessura da camada líquida apresentou uma tendência contrária à da velocidade do sólido, com a espessura aumentando para valores maiores de C . Esta tendência é condizente entre os dois resultados, uma vez que a menor velocidade do sólido proporciona a formação de uma camada líquida de maior espessura. Os efeitos da constante C sobre a espessura da camada líquida são manifestados também para o método misto. O aumento de C causa redução na amplitude das oscilações da espessura no início do processo, enquanto produz o aumento na espessura ao longo do tempo. Para o método VVM, o uso da Eq. (7.8) para descrever a viscosidade apresentou espessuras maiores em comparação com a Eq. (7.9). Para a malha refinada, as oscilações foram reduzidas no início do processo e a espessura não sofreu alterações significativas após este período inicial.

A Figura 8.33 mostra a espessura da camada líquida em diferentes posições angulares para os três métodos testados e para as versões média e transiente da Eq. (7.24), do estudo de Emerman e Turcotte (1983), para $t = 5$ min. Nesta figura é possível observar a tendência de aumento com o incremento de θ para os três métodos testados e para as duas versões da equação. No entanto, ocorreram desvios significativos entre os valores medidos e os resultados da Eq. (7.24) a partir de aproximadamente 60° , devido ao termo $\cos(\theta)$ presente no denominador, que resulta em uma divisão por zero quando $\theta = 90^\circ$. Em relação aos valores medidos, os métodos VVM e misto apresentaram valores bastante semelhantes entre si até $\theta = 75^\circ$, com uma tendência de aumento da espessura a partir desta posição para o método misto. No entanto, o método Darcy STM é o que apresenta espessura mais semelhante à calculada com a Eq. (7.24), principalmente na versão transiente no intervalo entre $0 < \theta < 40^\circ$.

Figura 8.33 – Espessura da camada líquida em função de θ em $t = 5$ min para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da Eq. (7.24).

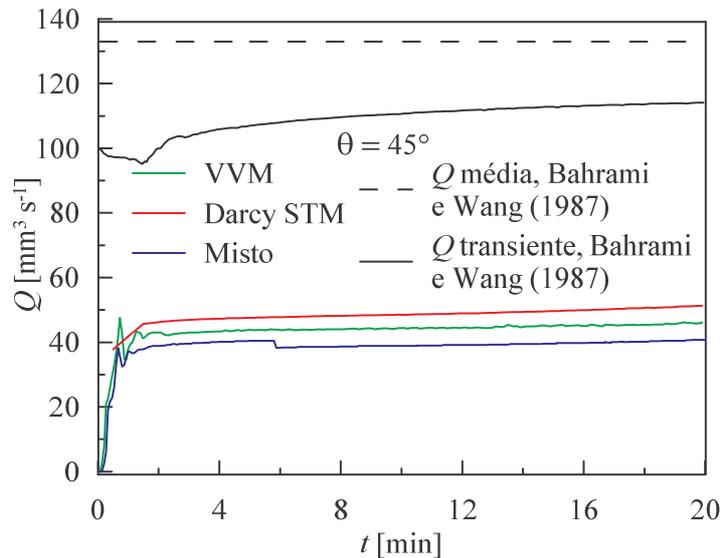


8.2.3.3 Vazão na camada líquida

Na Figura 8.34 são mostradas as vazões obtidas com os três métodos e nas versões média e transiente da Eq. (7.22) para $\theta = 45^\circ$. Os valores de vazão na camada líquida medida para os métodos Darcy STM, VVM e misto são semelhantes entre si ao longo do tempo, com as maiores diferenças em torno de 20 %. Na imagem, é possível observar que, após o período inicial de formação da camada líquida, a vazão permanece praticamente constante ao longo do processo. No entanto, são observadas diferenças significativas entre os valores medidos e os

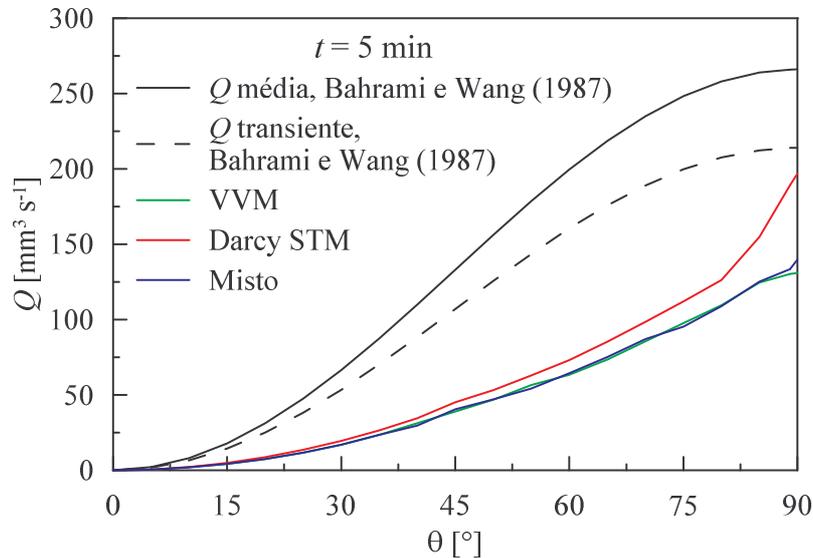
valores calculados através da Eq. (7.22) proveniente do estudo de Bahrami e Wang (1987), tanto na versão média quanto na versão transiente. Na versão transiente da equação, a tendência observada é de aumento ao longo do tempo. Nos casos com os métodos VVM e misto, são observadas oscilações na vazão, sendo estas reflexo das oscilações observadas na velocidade do sólido e na espessura da camada líquida, principalmente para o método VVM. Da mesma forma, as oscilações produzidas com o método misto apresentaram menor amplitude em comparação com o VVM, devido ao amortecimento proporcionado pela constante C . Já o método Darcy STM não apresentou oscilações, também condizendo com os demais resultados na camada líquida para este método.

Figura 8.34 – Vazão na camada líquida ao longo do tempo em $\theta = 45^\circ$ para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da Eq. (7.22).



Em relação à posição angular, a Figura 8.35 mostra a vazão para $t = 5$ min, para os três métodos testados e nas versões transiente e média da Eq. (7.22), do estudo de Bahrami e Wang (1987). Tanto as vazões medidas quanto as calculadas com a Eq. (7.22), aumentam com o incremento de θ . No entanto, a diferença entre a vazão medida nos métodos testados e a vazão calculada utilizando a Eq. (7.22), aumenta a partir da região inferior, se mantém aproximadamente constante entre as posições angulares de 55° e 70° , sendo reduzida na região superior da esfera. Assim como nos demais resultados na camada líquida, o estudo de Bahrami e Wang (1987) foi desenvolvido considerando o processo de mudança de fase isotérmico e a esfera completamente preenchida com PCM. Portanto, parte das diferenças entre os resultados da equação e dos valores medidos podem ser atribuídos a estas diferenças entre os processos analisados.

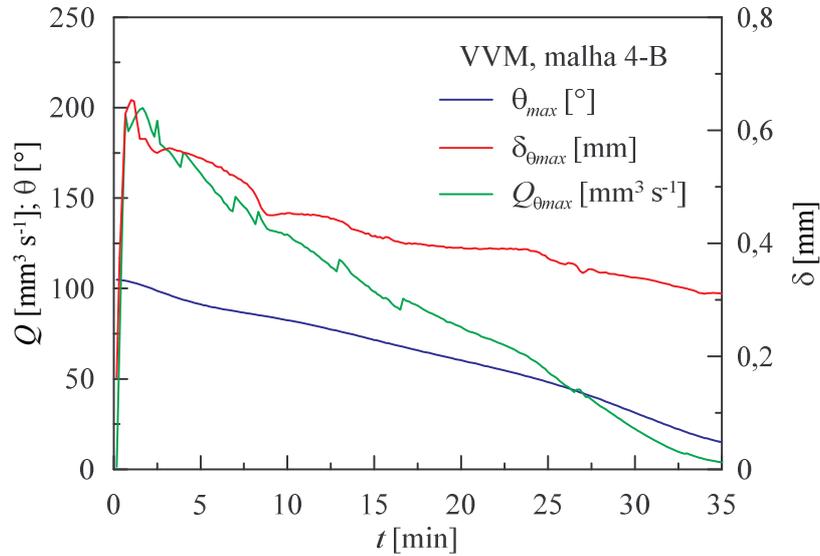
Figura 8.35 – Vazão na camada líquida em função de θ em $t = 5$ min para os métodos Darcy STM, VVM e misto, obtida no presente trabalho e através da Eq. (7.22).



8.2.3.4 Influência da camada líquida nos resultados globais

No processo de fusão de contato, a região camada líquida é determinante nos resultados, produzindo a maior parte da taxa de fusão. Conforme já observado na Seção 3.2, a proporção de material fundido na camada líquida se situa entre 85 e 90 % nos estudos que analisam este processo em geometria cilíndrica e esférica completamente preenchidas. A Figura 8.36 mostra a posição de θ_{max} , bem como a vazão e a espessura da camada líquida em θ_{max} ao longo do tempo para o método VVM com a malha de maior refino (4-B). A extensão da camada líquida é variável ao longo do processo, reduzindo-se conforme a proporção de PCM sólido diminui. Desta forma, o ângulo θ_{max} e conseqüentemente a área de contato também são reduzidos. Esta redução implica também na redução da vazão e na espessura da camada na posição θ_{max} . A espessura apresenta algumas oscilações esporádicas ao longo do tempo, enquanto a vazão apresenta maior quantidade de oscilações, principalmente para $t < 17$ min. Estas oscilações também foram observadas para os demais métodos, sendo mais frequentes para casos com menor refino na malha.

Figura 8.36 – Posição angular do final da camada líquida, espessura e vazão na camada líquida nesta posição ao longo do tempo para o método VVM com a malha 4-B.

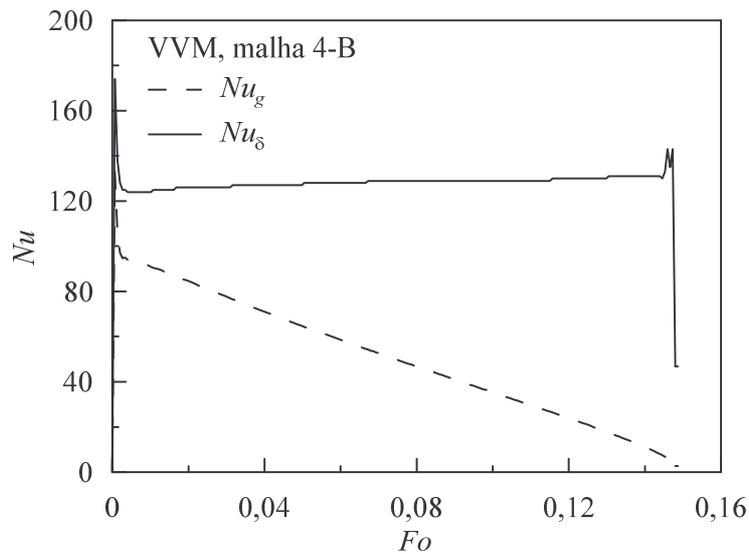


A posição de θ_{max} ao longo do tempo difere entre os métodos testados, uma vez que o tempo de fusão é diferente. A diferença é mais proeminente para o método Darcy STM, no qual a fusão é completada em um período menor em comparação com os métodos VVM e misto, que possuem resultados semelhantes. No entanto, o pico de vazão ocorre após 2 min para o método Darcy STM, e antes de 2 min para os métodos VVM e misto, evidenciando o efeito de amortecimento proporcionado pela constante C . Para determinar a proporção de PCM fundido na camada líquida, foi integrada a vazão em θ_{max} ao longo do tempo. Como os métodos Darcy STM e misto apresentaram significativa influência de C sobre a camada líquida, esta integração foi realizada somente no caso com o método VVM utilizando a malha 4-B. Em relação à massa de PCM, a proporção fundida na camada líquida é de aproximadamente 75 %.

Os resultados de fluxo de calor médio mostram uma redução ao longo do tempo, conforme observado na Figura 8.27. Esta tendência se reflete no número de Nusselt global, uma vez que este representa a adimensionalização do fluxo de calor. Em relação à região da camada líquida, o fluxo de calor local apresenta comportamento praticamente constante, com significativa redução na região acima do término da camada líquida, onde permanece o PCM líquido sobre a porção sólida. Da mesma forma, o número de Nusselt local é praticamente constante na região da camada líquida. A Figura 8.37 mostra os perfis de Nu_g e Nu_δ , em relação ao número de Fourier (Fo), na qual pode-se observar que Nu_g apresenta uma redução praticamente linear durante a maior parte do processo. O período inicial, que representa a formação da camada líquida, difere do restante do processo. Neste período inicial, ocorre o

pico de transferência de calor devido à temperatura inicial do PCM sólido, inferior à T_s . Ao final do processo, são observadas oscilações seguidas por uma queda significativa de Nu_δ , correspondendo aos instantes nos quais o sólido remanescente possui $\beta > 0$ e a determinação da camada líquida é imprecisa devido ao processo de mudança de fase com propriedades contínuas, enquanto Nu_g decresce continuamente.

Figura 8.37 – Número de Nusselt global e na camada líquida vs. Fo para o método VVM com a malha 4-B.



Durante o período em que Nu_δ possui comportamento aproximadamente constante, o valor médio equivale à Eq. (8.1), sendo que no caso analisado corresponde a $Nu_{\delta,med} = 128$.

$$Nu_{\delta,med} = \left(\frac{Pr Ar}{Ste} \right)^{1/3} \quad (8.1)$$

onde Ar é o número de Arquimedes e Pr é o número de Prandtl, definidos pelas Eq. (8.2) e (8.3), respectivamente.

$$Ar = \frac{g(\rho_s - \rho_l)r^3}{\mu^2} \quad (8.2)$$

$$Pr = \frac{C_{p,l}\mu}{k} \quad (8.3)$$

O valor de Nu_g , durante o período em que o mesmo possui comportamento linear, é descrito pela Eq. (8.4).

$$Nu_g = -FoSte \left(Pr^{1/2} \right) (GrAr)^{1/3} + \frac{7}{3} Pr \quad (8.4)$$

onde Gr é o número de Grashof, definido pela Eq. (8.5).

$$Gr = \frac{g\zeta\Delta T\rho_l^2 r^3}{\mu^2} \quad (8.5)$$

onde ζ é o coeficiente de expansão volumétrica do PCM líquido ($\zeta = 5 \times 10^{-4}$).

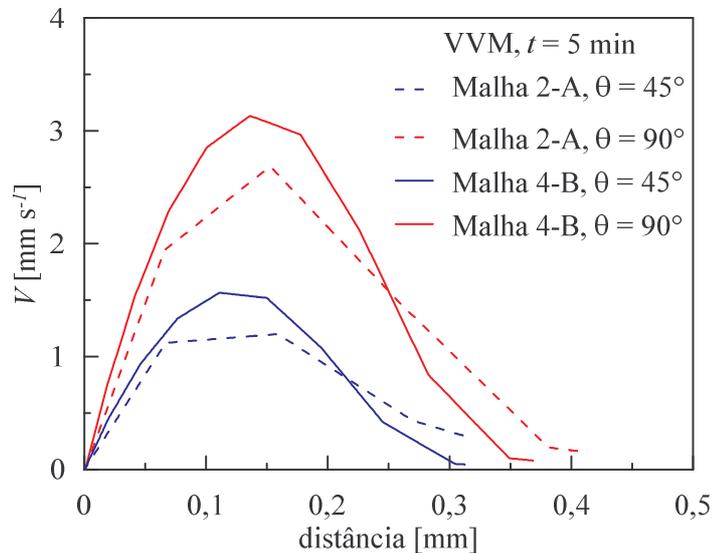
8.2.3.5 Discretização espacial na camada líquida

De modo a realizar uma verificação adicional da discretização, foi aplicado o cálculo do GCI na região da camada líquida, utilizando o método adaptado para variáveis locais conforme descrito por Celik et al. (2008). A variável escolhida foi a espessura da camada líquida por representar uma região de pequenas dimensões, com grande importância para o processo. Por se tratar de uma grandeza unidimensional na direção radial da esfera, o tamanho representativo da malha foi considerado como a espessura média dos elementos a partir da superfície da esfera na região analisada. A análise foi realizada nos casos que utilizam o método Darcy STM com $C = 2 \times 10^4$, na posição $\theta = 45^\circ$ desde os instantes iniciais até aproximadamente 22 min, já que após este período, as anomalias nos campos de fração líquida se aproximam desta posição para a malha de maior refino. Os valores do GCI apresentaram grandes variações nos instantes iniciais e finais, com valores abaixo de 2% para as malhas mais refinadas apenas no intervalo entre 4 e 9 min. No início do processo, as variações no GCI são maiores para as malhas com menos refino, com esta tendência se invertendo após os 9 min, quando as variações são significativamente maiores para as malhas mais refinadas, atingindo valores acima de 90%. Os resultados podem ser considerados mais

consistentes para as malhas menos refinadas, que apresentaram GCI médio de 6%, enquanto para as malhas de menor refino, o GCI médio foi 17%.

No entanto, não é possível verificar se as inconsistências observadas neste caso se devem exclusivamente à discretização espacial ou se podem ser atribuídas aos efeitos do método Darcy STM no deslocamento da porção sólida. No caso do método VVM, que não apresentou diferenças significativas no deslocamento da porção sólida, também podem ser observadas evidências de que o refinamento na região da camada líquida não é satisfatório. Na Figura 8.38 são mostrados os perfis de velocidade na camada líquida nas posições $\theta = 45^\circ$ e 90° em $t = 5$ min para as malhas 2-A e 4-B com o método VVM. Os perfis para ambas as malhas apresentam segmentos retos intercalados com ângulos pronunciados, que indicam a transição entre os elementos dentro da região. Mesmo com esta evidência da necessidade de maior refino na malha, é possível observar o aumento nas velocidades e na espessura da camada líquida para $\theta = 90^\circ$ em comparação com $\theta = 45^\circ$. Estas diferenças representam o incremento na vazão, que condiz com a tendência mostrada pela Eq. (7.22).

Figura 8.38 – Perfil de velocidade na camada líquida em $t = 5$ min nas posições $\theta = 45^\circ$ e 90° para as malhas 2-A e 4-B com o método VVM,



Como os resultados do perfil de velocidade também indicam uma necessidade maior de refinamento da malha na região da camada líquida, foi realizada uma estimativa do fator de refinamento necessário (Fr^*), utilizando a Eq. (8.6), de acordo com Roache (1997).

$$Fr^* = {}^{op_{med}}\sqrt{GCI_{32}/GCI^*} \quad (8.6)$$

onde op_{med} é a ordem aparente média dos resultados, GCI_{32} é o valor do GCI das malhas mais refinadas e GCI^* é o valor requerido do GCI , sendo este considerado 1,5, de acordo com Castro et al. (2011). No entanto, esta estimativa foi realizada a partir do maior valor de GCI_{21} , com as malhas menos refinadas (25,4%), uma vez que a inconsistência nos resultados com a malha mais refinada impossibilita seu uso nesta estimativa. Desta forma, o valor de Fr^* encontrado foi aproximadamente 20 em relação à malha 3-A. Este valor indica que, para atingir o GCI requerido seriam necessários elementos junto da parede com espessura 20 vezes menores que nesta malha, ou seja, aproximadamente 0,0025 mm. Em comparação com a malha com maior refino nesta região que foi utilizada no presente estudo (4-B), esta espessura é 4 vezes menor. No entanto, para limitar a razão de aspecto dos elementos, seria necessário um refinamento da mesma ordem de grandeza no comprimento dos mesmos. Tal grau de refinamento torna a simulação altamente dispendiosa nas condições de malha fixa, uma vez que a razão de aumento na quantidade de elementos em um domínio bidimensional seria equivalente ao quadrado de Fr^* . Utilizando esta proporção, a malha resultante teria aproximadamente 3×10^5 elementos.

Adicionalmente, é possível obter uma estimativa do tempo aproximado de simulação a partir dos resultados de η para outras configurações de malha com o método a ser utilizado, neste caso o VVM. Esta estimativa é feita rearranjando as Eq. (7.18) e (7.19), de modo a isolar o tempo computacional (tc). Assumindo $\eta = 5000$ e $dt = 0,001$ s, para a solução de um período de 35 min com 3×10^5 elementos, o tempo computacional necessário seria de aproximadamente 1450 dias. Ou seja, para obter uma solução com discretização adequada à realização de uma análise na camada líquida, ainda são necessárias melhorias nos métodos existentes para que possibilitem uma redução significativa no tempo computacional ou o desenvolvimento de modelos numéricos menos dispendiosos em termos de processamento.

9 CONCLUSÕES

Para os processos de fusão e solidificação de PCM em esfera, foram analisados os métodos de Darcy STM, VVM e misto para modelagem numérica da transição de velocidade entre as fases sólida e líquida, em conjunto com formulação baseada em entalpia para o calor latente. Os resultados foram comparados com estudos presentes na literatura. Adicionalmente, foi apresentado um método de avaliação do desempenho das simulações, em processos de solidificação e fusão. Para o processo de solidificação, foi realizada uma análise dos efeitos dos métodos de discretização e acoplamento pressão-velocidade, além dos testes de discretização temporal e espacial. Já no processo de fusão, além da comparação dos métodos de modelagem de mudança de fase, foi analisada a camada líquida que se forma entre o PCM sólido e a superfície aquecida. Os resultados de velocidade descendente da porção sólida, espessura da camada líquida e vazão na camada líquida foram comparados com equações provenientes de estudos presentes na literatura.

O modelo de mudança de fase mais adequado para processos de fusão não é o mais adequado para processos de solidificação. Os métodos Darcy STM e VVM produziram resultados mais próximos aos experimentais para o processo de solidificação e fusão, respectivamente. O uso inverso destes métodos, em relação aos processos citados, resultou em baixa precisão e até mesmo em divergência de solução. Ou seja, o método Darcy STM é mais indicado para processos de mudança de fase nos quais o sólido não se movimenta, enquanto que o método VVM é mais indicado para processos nos quais ocorre movimentação da porção sólida, como a fusão de contato. O método misto apresentou resultados intermediários, porém próximos às melhores configurações para ambos os processos.

Quanto à discretização espacial, o método Darcy STM produz melhores resultados no processo de fusão para malhas com menos refino. Por outro lado, para o método VVM, os resultados e a convergência são melhorados com o refino da malha. Desta forma, o método VVM se assemelha a métodos de simulação direta, nos quais é possível observar características locais de pequenas dimensões, porém é necessário um alto grau de refino da malha. Já o método Darcy STM remete a métodos que utilizam simplificações, como RANS (*Reynolds-averaged Navier-Stokes*) ou LES (*Large Eddy Simulation*), nos quais é possível utilizar malhas com baixo grau de refino, porém a observação de características de pequenas dimensões é dificultada ou impossibilitada.

O uso do modelo multifásico com o método VVM acarreta em dificuldades de convergência, isto devido ao elevado gradiente de viscosidade, enquanto os efeitos nos

resultados são muito pequenos. Já no método Darcy STM são observados efeitos bastante pronunciados nos resultados, enquanto a influência do modelo multifásico é baixa na convergência da simulação.

Em relação aos métodos de acoplamento pressão-velocidade, pode-se concluir que o método SIMPLE apresenta menor custo computacional, quando comparado ao método PISO. No entanto, o método PISO produz resultados mais precisos para gradientes acentuados, como a região de transição entre sólido e líquido. Com relação aos métodos de discretização, tanto para processos de solidificação quanto para os de fusão, o método *First Order Upwind* apresentou maiores dificuldades de convergência em comparação com *Second Order Upwind* e *Power Law*.

Quanto à taxa de resolução, é possível concluir que, para um mesmo modelo de mudança de fase, os valores deste indicador são próximos para os processos de solidificação e fusão. Para os modelos analisados, as taxas de resolução mais elevadas foram observadas para o método Darcy STM, quando comparado aos métodos VVM e misto, que apresentaram taxas de resolução similares. A maior taxa de resolução do método Darcy STM indica maior facilidade de convergência, condizendo com a ampla utilização deste método na literatura, em comparação com as demais formulações de transição de velocidade entre as fases.

Os resultados obtidos na análise da camada líquida na fusão de contato indicam uma dependência significativa das configurações no método Darcy STM, quando comparado aos métodos VVM e misto. Já as configurações do método VVM não apresentaram efeitos nos resultados da camada líquida. Portanto, o método VVM pode ser considerado mais adequado para o estudo numérico da camada líquida na fusão de contato. No entanto, o refino da malha não foi suficiente para prover a adequada consistência nos resultados, sendo então necessária uma malha computacional com alto grau de refino, que por sua vez, implica em um elevado custo computacional.

9.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para trabalhos futuros sugere-se:

- a) verificação de outras combinações de modelos de mudança de fase, tais como modelos baseados em temperatura ou com termo fonte na equação da energia;
- b) verificação dos modelos testados no presente trabalho para cavidades com outras geometrias;

- c) análise de outros métodos de modelagem da interface entre os fluidos no modelo multifásico VOF, em conjunto com o método VVM;
- d) verificação da aplicabilidade de outros modelos multifásicos, a exemplo do modelo euleriano, em conjunto com modelos de mudança de fase;
- e) desenvolvimento de método para realização de medições experimentais na região da camada líquida no processo de fusão de contato;
- f) utilização de malha adaptativa para analisar a camada líquida.

REFERÊNCIAS

- ABHAT, A. Low temperature latent heat thermal energy storage: heat storage materials. **Solar Energy**, v. 30, n. 4, pp. 313-332, 1983.
- AGYENIM, F.; HEWITT, N.; EAMES, P.; SMYTH, M. A review of materials, heat transfer and phase change problem formulation for latent heat thermal energy storage systems (LHTESS). **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, n. 14, pp. 615-628, 2010.
- AL-ABIDI, A.A.; MAT, S.; SOPIAN, K.; SULAIMAN, M.Y.; MOHAMMAD, A.T. Numerical Study of PCM solidification in a triplex tube heat exchanger with internal and external fins. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, n. 61, pp. 684-695, 2013.
- AMIRYAR, M.E.; PULLEN, K.R. A review of flywheel energy storage system technologies and their applications. **Applied Sciences**, v. 7, n. 3, 2017.
- ASAKO, Y.; FAGHRI, M. Effect of density change on melting of unfixed rectangular phase-change material under low-gravity environment. **Numerical Heat Transfer: Part A: Applications**, v. 36, n. 8, pp. 825-838, 1999.
- ASAKO, Y.; FAGHRI, M.; CHARMCHI, M.; BAHRAMI, P.A. Numerical solution for melting of unfixed rectangular phase-change material under low-gravity. **Numerical Heat Transfer, Part A: Applications**, v. 25, pp. 191-208, 1994.
- ASSIS, E.; KATSMAN, L.; ZISKIND, G.; LETAN, R. Numerical and experimental study of melting in a spherical shell. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, n. 50, pp. 1790-1804, 2007.
- ASSIS, E.; ZISKIND, G.; LETAN, R. Numerical and experimental study of solidification in a spherical shell. **Journal of Heat Transfer**, v. 131, 2009.
- BAHRAMI, P.A.; WANG, T.G. Analysis of Gravity and Conduction-Driven Melting in a Sphere. **Journal of Heat Transfer**, v. 109, pp. 806-809, 1987.
- BAREISS, M.; BEER, H. An analytical solution of the heat transfer process during melting of an unfixed solid phase change material inside a horizontal tube. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 27, n. 5, pp. 739-746, 1984.
- BARTH, T.J.; JESPERSEN, D. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. In: **27th Aerospace Sciences Meeting**, Reno, Nevada, EUA, 1989.
- BASSO, C.A. **Análise numérica da dissipação térmica em esferas de PCM**. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Engenharia Mecânica) – Universidade do Vale do Rio dos Sinos (UNISINOS). São Leopoldo, 2017.
- BEJAN, A. Single Correlation for theoretical contact melting results in various geometries. **International communications in heat and mass transfer**, v. 19, pp. 473-483, 1992.
- BENNON, W.D.; INCROPERA, F.P. A Continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems – I. Model formulation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 30, n. 10, pp. 2161-2170, 1987.

BERGMAN, T. L., INCROPERA, F. P., LAVINE, A. S., DEWITT, D. P., Introduction to Heat Transfer, John Wiley & Sons, Inc., 2011.

BORAHHEL, R.S.; OLIVESKI, R.C.; FAISTAUER, F. Erythritol solidification in a sphere: a numerical study. In: **23rd International Congress of Mechanical Engineering**. Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2015.

BORAHHEL, R.S.; RAYMUNDO Junior, J.; OLIVESKI, R.C. Análise bidimensional do processo de fusão de um material de mudança de fase em uma cavidade retangular. **Scientia Plena**. v. 11, n. 08, 2015.

BORAHHEL, R.S.; RAYMUNDO Junior, J.; OLIVESKI, R.C. Numerical study of the erythritol melting process in a vertical cylindrical tube. In: **15th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**. Belém, Pa, Brasil, 2014.

BROOKS, D.; MARTONOSI, M. Dynamic thermal management for high-performance microprocessors. In: **7th International Symposium on High-Performance Computer Architecture**. Monterrey, Mexico, 2001.

CAO, Y.; FAGHRI, A. A Numerical Analysis of Phase-Change Problems Including Natural Convection. **Journal of Heat Transfer**, v. 112, pp. 812-816, 1990.

CASTRO, L.; URQUIZA, G.; ADAMKOWSKI, A.; REGGIO, M. Experimental and numerical simulations predictions comparison of power and efficiency in hydraulic turbine. **Modeling and Simulation in Engineering**, v. 2011, p. 1-8, 2011.

CELIK, I.B.; GHIA, U.; ROACHE, P.J.; FREITAS, C.J.; COLEMAN, H.; RAAD, P.E. Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications. **Journal of Fluids Engineering**, v. 130, 2008

ÇENGEL, Y.A.; GHAJAR, A.J. **Transferência de calor e Massa: Uma Abordagem Prática**. 4ª Edição. AMGH Editora, 2012.

CHAN, C.W.; TAN, F.L. Solidification inside a sphere – an experimental study. **International Communications in Heat and Mass Transfer**. nº 33, pp. 335-341, 2006.

CHAPRA, S.C.; CANALE, R.P. **Numerical Methods for Engineers**. 6ª Edição. McGraw-Hill, 2010.

CLEAVES II, H.J.J. **Encyclopedia of Astrobiology**. Springer Berlin Heidelberg, 2015.

DANAILA, I.; MOGLAN, R.; HECHT, F.; MASSON, S.L. A Newton method with adaptive finite elements for solving phase-change problems with natural convection. **Journal of Computational Physics**, v. 274, pp. 826-840, 2014.

DINÇER, I.; ROSEN, M.A. **Thermal Energy Storage: Systems and applications**. 7ª Edição. Chichester, Inglaterra, Wiley, 2011.

DUBOVSKY, V.; ASSIS, E.; KOCHAVI, E.; ZISKIND, G.; LETAN, R. Study of solidification in vertical cylindrical shells. In: 5th European Thermal-Sciences Conference, Holanda, 2009.

DUTIL, Y.; ROUSSE, D.R.; SALAH, N.B.; LASSUE, S.; ZALEWSKI, L. A review on phase-change materials: Mathematical modeling and simulations. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, n. 15, pp. 112-130, 2011.

EGOLF, P.W.; MANZ, H. Theory and modeling of phase change materials with and without mushy regions. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 37, n. 18, pp. 2917-2924, 1994.

EHMS, J.H.N; BODNAR, F.A.; SANTOS, I.D.R.; OLIVESKI, R.C. Numerical analysis of liquid fraction and heat flux in the solidification process of erythritol in spheres. **Engenharia Térmica (Reterm)**, v. 16, n. 1, pp. 24-30, 2017.

EHMS, J.H.N; OLIVESKI, R.C; ROCHA, L.A.O. Análise de configurações do modelo numérico na solidificação de PCM em esfera. In: **XX ENMC – Encontro Nacional de Modelagem Computacional e VIII ECTM – Encontro de Ciência e Tecnologia de Materiais**. Nova Friburgo, RJ, Brasil, 2017.

EHMS, J.H.N; OLIVESKI, R.C; ROCHA, L.A.O; BISERNI, C. Theoretical and numerical analysis on phase change materials (PCM): A case study of the solidification process of erythritol in spheres. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 119, pp. 523-532, 2018.

EMERMAN, S.H.; TURCOTTE, D.L. Stokes's problem with melting. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 26, n. 11, pp. 1625-1630, 1983.

EREK, A.; ILKEN, Z.; ACAR, M.A. Experimental and numerical investigation of thermal energy storage with a finned tube. **International journal of energy research**, v. 29, n. 4, pp. 283-301, 2005.

ESTRÁZULAS, J.J. **Estudo numérico da mudança de fase de PCMs em cavidades cilíndricas**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade do Vale do Rio dos Sinos (UNISINOS). São Leopoldo, 2015.

FADEN, A.; KÖNIG-HAAGEN, A.; HÖHLEIN, S.; BRÜGGEMANN, D. An implicit algorithm for melting and settling of phase change material inside macrocapsules. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 117, pp. 757-767, 2018.

FAISTAUER, F. **Estudo numérico do processo de mudança de fase de PCMs em cavidades esféricas**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade do Vale do Rio dos Sinos (UNISINOS). São Leopoldo, 2016.

FAISTAUER, F.; RODRIGUES, P.; OLIVESKI, R.C. Numerical study of phase change of PCM in spherical cavities. **Defect and Diffusion Forum**, v. 372, pp. 21-30, 2016.

FALLAHI, A.; GULDENTOPS, G.; TAO, M.; GRANADOS-FOCIL, S.; VAN DESSEL, S. Review on solid-solid phase change materials for thermal energy storage: Molecular structure and thermal properties. **Applied Thermal Engineering**, v. 127, pp. 1427-1441, 2017.

- FARID, M.M.; KHUDHAIR, A.M.; RAZACK, S.A.K.; AL-HALLAJ, S. A review on phase change energy storage: materials and applications. **Energy Conversion and Management**, n. 45, pp. 1597-1615, 2004.
- FOMIN, F.A.; SAITOH, T.S. Melting of unfixed material in spherical capsule with non-isothermal wall. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 42, pp. 4197-4205, 1999.
- GARCIA, A.; CABEZA, L.F. Numerical simulation of a PCM packed bed system: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 69, pp. 1055-1063, 2017.
- GAU, C.; VISKANTA, R. Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall. **Journal of Heat Transfer**, v. 108, pp. 174-181, 1986.
- GE, H.; LI, H.; MEI, S.; LIU, J. Low melting point liquid metal as a new class of phase change material: An emerging frontier in energy area. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, n. 21, pp. 331-346, 2013.
- GHASEMI, B.; MOLKI, M. Melting of unfixed solids in square cavities. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, n. 20, pp. 446-452, 1999.
- GIL, A.; MEDRANO, M.; MARTORELL, I.; LÁZARO, A.; DOLADO, P.; ZALBA, B.; CABEZA, L.F. State of the art on high temperature thermal energy storage for power generation. Part 1 – Concepts, materials and modellization. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, n. 14, pp. 31-55, 2010.
- GOLDSTEIN, R.J.; SPARROW, E.M.; JONES, D.C. Natural convection mass transfer adjacent to horizontal plates. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 16, pp. 1025-1035, 1973.
- GONG, Z.-X.; MUJUMDAR, A.S. Thermodynamic optimization of the thermal process in energy storage using multiple phase change materials. **Applied Thermal Engineering**, v. 17, n. 11, pp. 1067-1083, 1997.
- HALE, D.V.; HOOVER, M.J.; O'NEILL, M.J. **Phase Change Materials Handbook**. NASA, George C. Marshall Space Flight Center, Alabama, 1971.
- HIRATA, T.; MAKINO, Y.; KANEKO, Y. Analysis of close-contact melting for octadecane and ice inside isothermally heated horizontal rectangular capsule. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 34, n. 12, pp. 3097-5106, 1991.
- HIRT, C.W.; NICHOLS, B.D. Volume of fluid method for the dynamics of free boundaries. **Journal of Computational Physics**, n. 39, pp. 201-225, 1981.
- HOLMES, D.G.; CONNELL, S.D. Solution of the 2D Navier-Stokes equations on unstructured adaptive grids. In: **9th Computational Fluid Dynamics Conference**, 1989.
- HU, H.; ARGYROPOULOS, S.A. Mathematical modelling of solidification and melting: a review. **Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering**, v. 4, pp. 371-396, 1996.

- ISMAIL, K.A.R.; LINO, F.A.M.; da SILVA, R.C.R.; de JESUS, A.B.; PAIXÃO, L.C. Experimentally validated two dimensional numerical model for the solidification of PCM along a horizontal long tube. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 75, pp. 184-193, 2014.
- ISSA, R.I. Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting. **Journal of Computational Physics**, n.62, 40-65, 1985.
- JAGUEMONT, J.; OMAR, N.; VAN DEN BOSSCHE, P.; MIERLO, J. Phase-change materials (PCM) for automotive applications: A review. **Applied Thermal Engineering**, v. 132, pp. 308-320, 2018.
- KASIBHATLA, R.R.; KÖNIG-HAAGEN, A.; BRÜGGEMANN, D. Numerical Modelling of Wetting Phenomena during Melting of PCM. **Procedia Engineering**, v. 157, pp. 139-147, 2016.
- KASIBHATLA, R.R.; KÖNIG-HAAGEN, A.; RÖSLER, F.; BRÜGGEMANN, D. Numerical modelling of melting and settling of an encapsulated PCM using variable viscosity. **Heat and Mass Transfer**, v. 53, n. 5, pp.1735-1744, 2017.
- KATSMAN, L.; DUBOVSKY, V.; ZISKIND, G.; LETAN, R. Experimental investigation of solid-liquid phase change in cylindrical geometry. In: 2007 ASME-JSME Thermal Engineering Summer Heat Transfer Conference, Vancouver, Canadá, 2007.
- KENISARIN, M.M. High-temperature phase change materials for thermal energy storage. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, n. 14, pp. 955-970, 2010.
- KENISARIN, M.M.; KENISARINA, K.M. Form-stable phase change materials for thermal energy storage. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, n. 16, pp. 1999-2040, 2012.
- KOZAK, Y.; ZISKIND, G. Novel enthalpy method for modeling of PCM melting accompanied by sinking of the solid phase. **International Journal of Heat and Mass Transfer**. n. 112, pp. 568-586, 2017.
- LAMBERG, P.; LEHTINIEMI, R.; HENELL, A.M. Numerical and experimental investigation of melting and freezing processes in phase change material storage. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 43, n. 3, pp. 277-287, 2004.
- MA, Z.; ZHANG, Y. Solid velocity correction schemes for a temperature transforming model for convection phase change. **International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow**, v. 16, n. 2, pp. 204-225, 2006.
- MACPHEE, D.; DINÇER, I. Heat transfer and thermodynamic analyses of some typical encapsulated ice geometries during discharging process. **Journal of Heat Transfer**, v. 131, n. 8, 2009.
- MALISKA, C.R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: Fundamentos e coordenadas generalizadas**. Livros Técnicos e Científicos Editora S/A. Rio de Janeiro – RJ, 1995.

- MEDRANO, M.; GIL, A.; MARTORELL, I.; POTATU, X.; CABEZA, L.F. State of the art on high-temperature thermal energy storage for power generation. Part 2-Case studies. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 14, n. 1, pp. 56–72, 2010.
- MICHELS, H.; PITZ-PAAL, R. Cascaded latent heat storage for parabolic trough solar power plants. **Solar Energy**, v. 81, n. 6, pp. 829–837, 2007.
- MOALLEMI, M.K.; WEBB, B.W.; VISKANTA, R. An experimental and analytical study of close-contact melting. **Journal of Heat Transfer**, v. 108, pp. 894-899, 1986.
- MONDAL, S. Phase change materials for smart textiles – An overview. **Applied Thermal Engineering**, v. 28, pp. 1536-1550, 2008.
- MORGAN, K. A numerical analysis of freezing and melting with convection. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, n°28, 275-284, 1981.
- NOMURA, T.; OKINAKA, N.; AKIYAMA, T. Technology of latent heat storage for high temperature application: A review. **ISIJ International**, v. 50, n. 9, pp. 1229-1239, 2010.
- OLIVESKI, R.C.; DEL COL, D. Numerical Simulation of Thermal Energy Storage with PCM. In: **Eurotherm Seminar #99: Advances in Thermal Energy Storage**. Lleida, Espanha, 2014.
- ORÓ, E.; CHIU, J.; MARTIN, V.; CABEZA, L.F. Comparative study of different numerical models of packed bed thermal energy storage systems. **Applied Thermal Engineering**, v. 50, pp. 384-392, 2013.
- PAL, D.; JOSHI, Y.K. Melting in a side heated tall enclosure by a uniformly dissipating heat source. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, n. 44, pp. 375-387, 2001.
- PATANKAR, S. **Numerical heat transfer and fluid flow**. CRC Press, 1980.
- PCM PRODUCTS Ltd. **PCM Products**. Hatfield, Inglaterra. Disponível em: <http://www.pcmproducts.net/Phase_Change_Material_Products.htm>. Acesso em: 12 set. 2017.
- POIRIER, D.; SALCUDEAN, M. On numerical methods used in mathematical modeling of phase change in liquid metals. **Journal of Heat Transfer**, v. 110, n. 3, pp. 562–570, 1988.
- RAUSCH, R.; YANG, H.; BATINA, J. Spatial adaption procedures on unstructured meshes for accurate unsteady aerodynamic flow computation. In: **32nd Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference**, 1991.
- RAYMUNDO JUNIOR, J.F. **Estudo numérico do processo de mudança de fase de PCM em esferas com fluxo de calor variável**. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Engenharia Mecânica) – Universidade do Vale do Rio dos Sinos (UNISINOS). São Leopoldo, 2017.
- RAYMUNDO JUNIOR, J.F.; BORAHEL, R.S.; OLIVESKI, R.C. Numerical study of the erythritol melting process in a tridimensional rectangular cavity. **Engenharia Térmica (ReTerm)**, v. 14, n. 1, pp. 88-94, 2015.

RAYMUNDO JUNIOR, J.F.; OLIVESKI, R.C. Erythritol melt fraction correlation for tall enclosure PCM based heat sinks. In: **23rd International Congress of Mechanical Engineering**. Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2015.

REDDY, J.N.; GARTLING, D.K. **The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics**. 3ª Edição. CRC Press, 2010.

ROACHE, P.J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. **Journal of Fluids Engineering**, v.116, n.3, pp. 405-413, 1994.

ROACHE, P.J. Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics. **Annual Review of Fluid Mechanics**, vol. 29, p. 123-160, 1997.

ROY, C.J. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. **Journal of Computational Physics**, v. 205, pp. 131-156, 2005.

ROY, S.K.; SENGUPTA, S. Gravity-assisted melting in a spherical enclosure: Effects of natural convection. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 33, n. 6, pp. 1135–1147, 1990.

SAHOO, S.K.; DAS, M.K.; RATH, P. Application of TCE-PCM based heat sinks for cooling of electronic components: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**. v. 59, pp. 557-568, 2016.

SAITOH, T.; KATO, K. Experiment on melting in heat storage capsule with close contact and natural convection. **Experimental thermal and fluid science**, v. 6, n. 3, pp. 273-281, 1993.

SAMARA, F.; GROULX, D.; BIWOLE, P.H. Natural Convection Driven Melting of Phase Change Material: Comparison of Two Methods. In: Excerpt from the Proceeding of the COMSOL Conference. Boston, EUA, 2012.

SAMARSKII, A.A.; VABISHCHEVICH, P.N.; ILIEV, O.P.; CHURBANOV, A.G. Numerical simulation of convection/diffusion phase change problems – a review. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 36, n. 17, pp. 4095-4106, 1993.

SARO, O.; De ANGELIS, A.; D’ELIA, S.; LORENZINI, G. Utilization of phase change materials (PCM) for energy recovery in the steelmaking industry. **Journal of Engineering Thermophysics**, v. 22, n. 2, pp. 93-110, 2013.

SAS IP, Inc. ANSYS Fluent 16.1 Theory Guide, 2015.

SHALABY, S.M.; BEK, M.A.; EL-SEBAILI, A.A. Solar dryers with PCM as energy storage medium: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 33, pp. 110-116, 2014.

SHAMSUNDAR, N.; SPARROW, E.M. Effect of density change on multidimensional conduction phase change. **Journal of Heat Transfer**, pp. 550-557, 1976.

SHARIF, M.K.A.; AL-ABIDI, A.A.; MAT, S.; SOPIAN, K.; RUSLAN, M.H.; SULAIMAN, M.Y.; ROSLI, M.A.M. Review of the application of phase change material for heating and domestic hot water systems. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 42, pp. 557–568, 2015.

SHARMA, A.; TYAGI, V.V.; CHEN, C.R.; BUDDHI, D. Review on thermal energy storage with phase change materials and applications. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, n. 13, pp. 318-345, 2009.

SHOKOUHMAND, H.; KAMKARI, B. Experimental investigation on melting heat transfer characteristics of lauric acid in a rectangular thermal storage unit. **Experimental Thermal and Fluid Science**, n. 50, pp. 201-212, 2013.

SILVEIRA, A.M. **Efeito de aletas em cavidade retangular no processo de fusão do PCM ácido láurico**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade do Vale do Rio dos Sinos (UNISINOS). São Leopoldo, 2017.

SILVEIRA, A.M.; SANTOS, I.D.R.; OLIVESKI, R.C. Análise da fusão do PCM ácido Láurico em cavidade retangular com aleta horizontal. In: **7ª Conferência Sul em Modelagem Computacional**. Rio Grande, RS, Brasil, 2016.

SPARROW, E.M.; GEIGER, G.T. Melting in a horizontal tube with the solid either constrained or free to fall under gravity. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 29, n. 7, pp. 1007-1019, 1986.

STEFAN, J. Über die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere. **Annalen der Physik**, v. 278, n. 2, pp. 269-286, 1891.

STEINMANN, W.D.; ECK, M. Buffer storage for direct steam generation. **Solar Energy**, v. 80, n. 10, pp. 1277-1282, 2006.

SWAMINATHAN, C.R.; VOLLER, V.R. A general enthalpy method for modeling solidification processes. **Metallurgical Transactions B**, v. 23B, pp. 651-664, 1992.

TAN, F.L.; Constrained and unconstrained melting inside a sphere. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, n.º. 35, pp. 466-475, 2008.

TAN, F.L.; FOK, S.C. Melt fraction estimation using solid modeling for melting inside a sphere. **Computer Applications in Engineering Education**, v. 18, n. 2, p. 290-297, 2010.

VAN DOORMAAL, J.P.; RAITHBY, G.D. Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows. **Numerical heat transfer**, v. 7, pp. 147-163, 1984.

VERSTEEG, H.K., MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. Longman Scientific & Technical, 1995.

VISKANTA, R.; GAU, C. Inward solidification of a superheated liquid in a cooled horizontal tube. **Wärme- und Stoffübertragung**, n. 17, pp. 39-46, 1982.

VOLLER, V.R.; BRENT, A.D.; PRAKASH, C. The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 32, n. 9, pp. 1719-1731, 1989.

VOLLER, V.R.; CROSS, M.; MARKATOS, N.C. An enthalpy method for convection/diffusion phase change. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 24, pp. 271-284, 1987.

VOLLER, V.R.; PRAKASH, C. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 30, n. 8, pp. 1709-1717, 1987.

VOLLER, V.R.; SWAMINATHAN, C.R. General source-based method for solidification phase change. **Numerical Heat Transfer**, v. 19, pp. 175-189, 1991.

VOLLER, V.R.; SWAMINATHAN, C.R.; THOMAS, B.G. Fixed grid techniques for phase change problems: A review. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 30, pp. 875-898, 1990.

XU, Y.; He, Y.L.; Li, Y.Q.; Song, H.J. Exergy analysis and optimization of charging–discharging processes of latent heat thermal energy storage system with three phase change materials. **Solar Energy**, v. 123, pp. 206-216, 2016.

YAGI, J.; AKIYAMA, T. Storage of thermal energy for effective use of waste heat from industries. **Journal of Materials Processing Technology**, vol. 48, pp. 793–804, 1995.

YOUNGS, D.L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. **Numerical methods for fluid dynamics**, 1982.

ZALBA, B.; MARÍN, J.M.; CABEZA, L.F.; MEHLING, H. Review on thermal energy storage with phase change: materials, heat transfer analysis and applications. **Applied Thermal Engineering**, n. 23, pp. 251-283, 2003.

ZIAEI, S.; LORENTE, S.; BEJAN, A. Constructal design for convection melting of a phase change body. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 99, pp. 762–769, 2016.

APÊNDICE A – PROGRAMAÇÃO UTILIZADA NAS UDF DE VISCOSIDADE

Programação que define a função mostrada na Eq. (7.8):

```

/*****
UDF that simulates solidification by specifying a liquid fraction-dependent viscosity
property
*****/

#include "udf.h"

DEFINE_PROPERTY(cell_viscosity,c,t)
{
    real mu_lam;
    real liqf = C_LIQF(c,t);
    mu_lam = 0.00342 + ((1 - liqf) * (1 - liqf)) / ((liqf * liqf * liqf) + 0.001);
    return mu_lam;
}

```

Programação que define a função mostrada na Eq. (7.9):

```

/*****
UDF that simulates solidification by specifying a liquid fraction-dependent viscosity
property
*****/

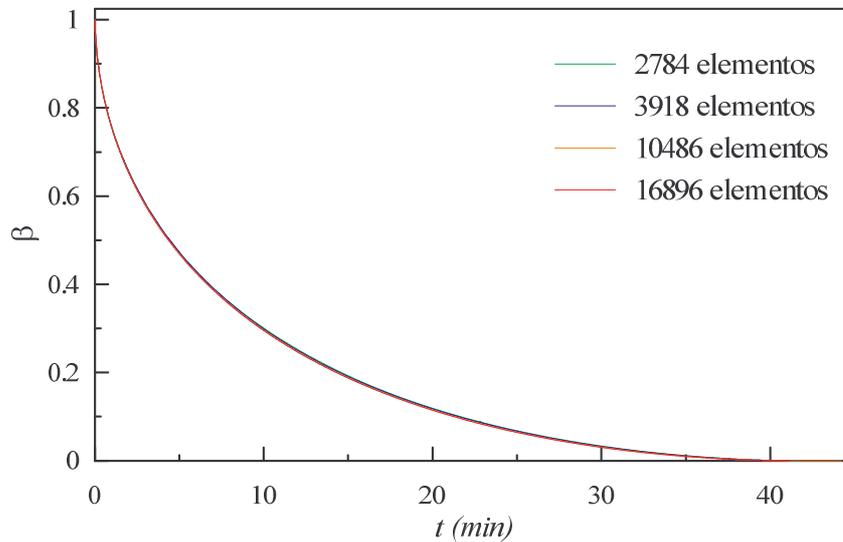
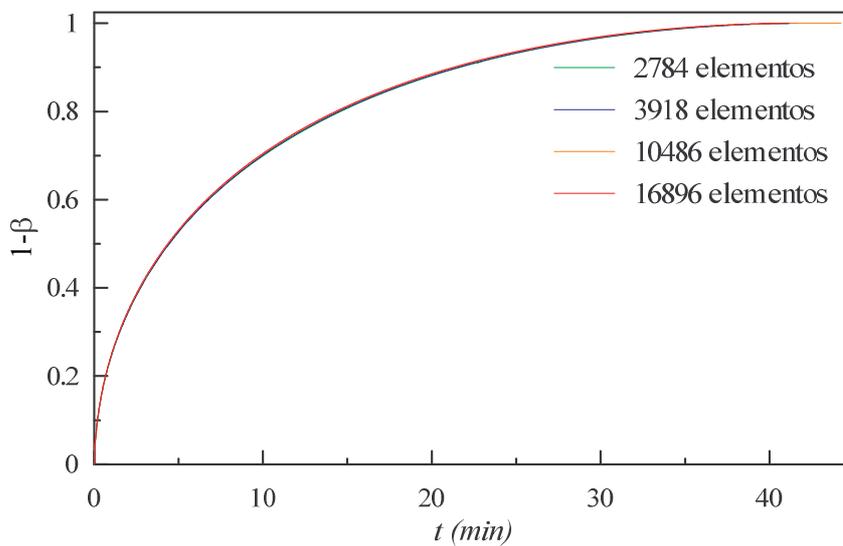
#include "udf.h"

DEFINE_PROPERTY(cell_viscosity,c,t)
{
    real mu_lam;
    real liqf = C_LIQF(c,t);
    mu_lam = 0.00342 + ((1 - liqf) * (1 - liqf) * (1 - liqf)) / ((sqrt(liqf)) + 0.001);
    return mu_lam;
}

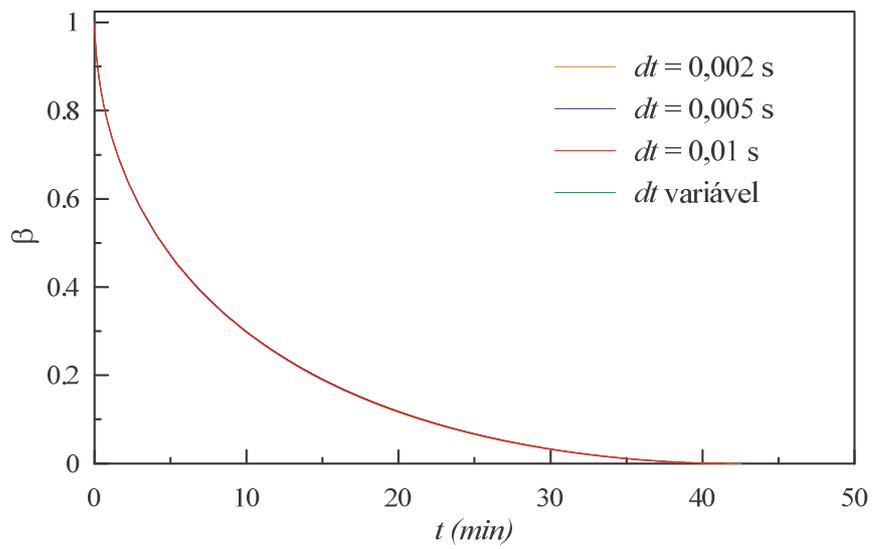
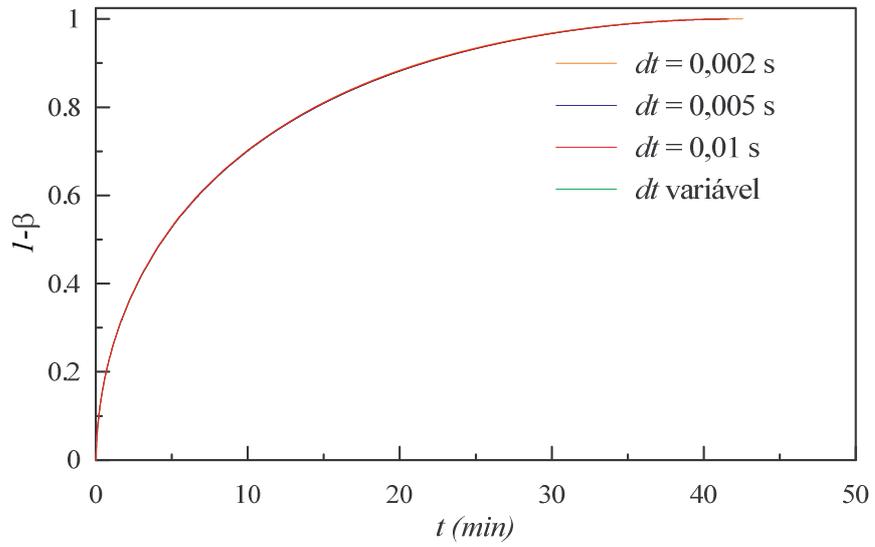
```

APÊNDICE B – GRÁFICOS ADICIONAIS DE FRAÇÃO LÍQUIDA E FLUXO DE CALOR PARA O PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO

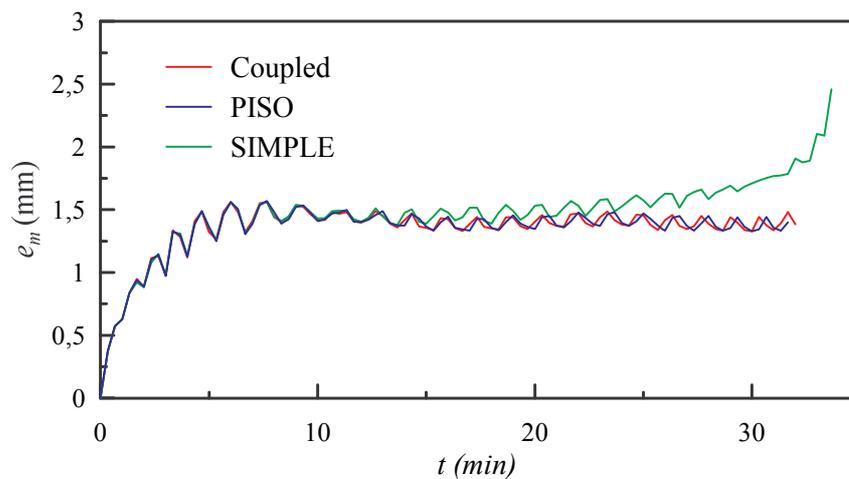
1 – Fração sólida e fração líquida nos testes de discretização espacial.



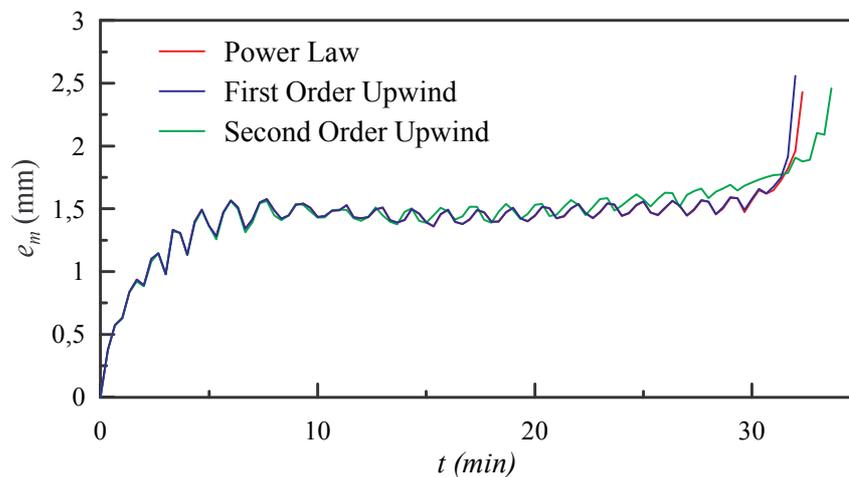
2 – Fração sólida e fração líquida nos testes de discretização temporal.



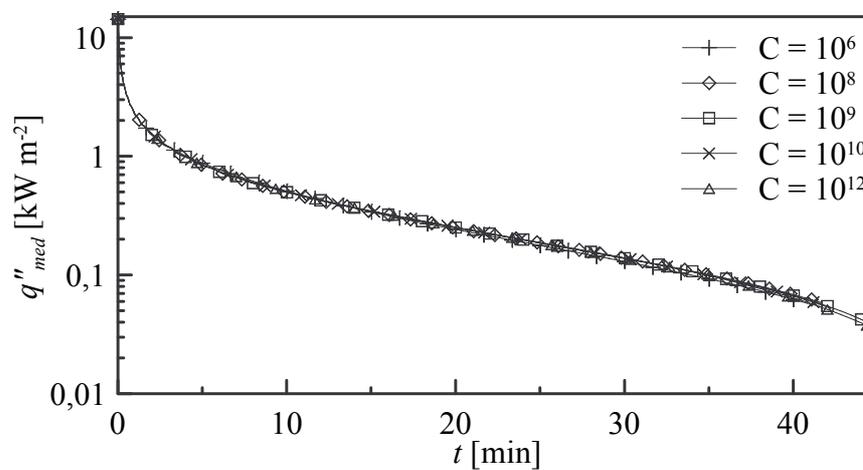
3 – Espessura da camada de transição para os métodos de acoplamento pressão-velocidade.



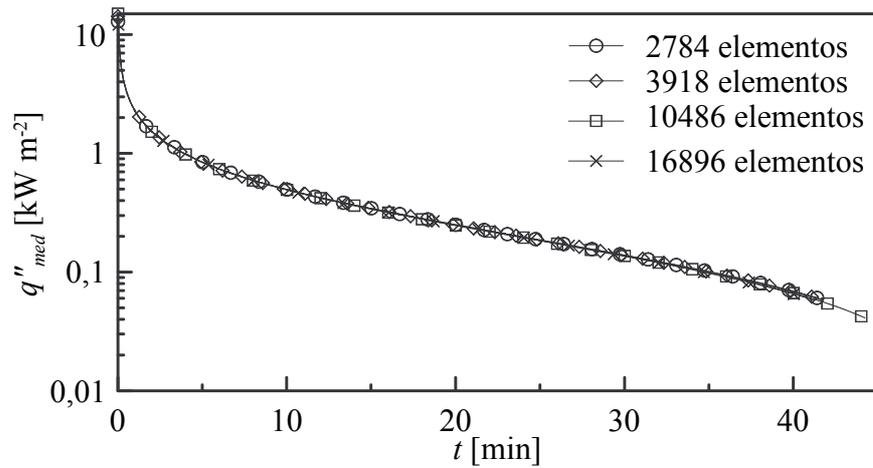
4 – Espessura da camada de transição para os métodos de discretização.



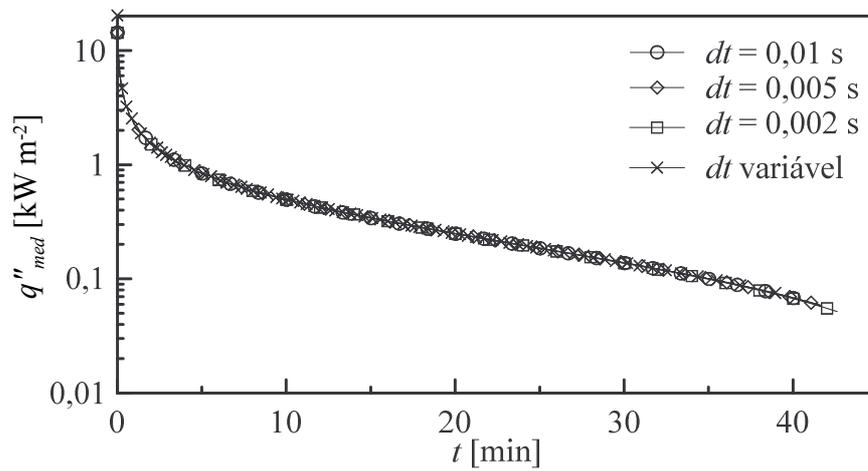
5 – Fluxo de calor médio para as configurações testadas no método Darcy STM.



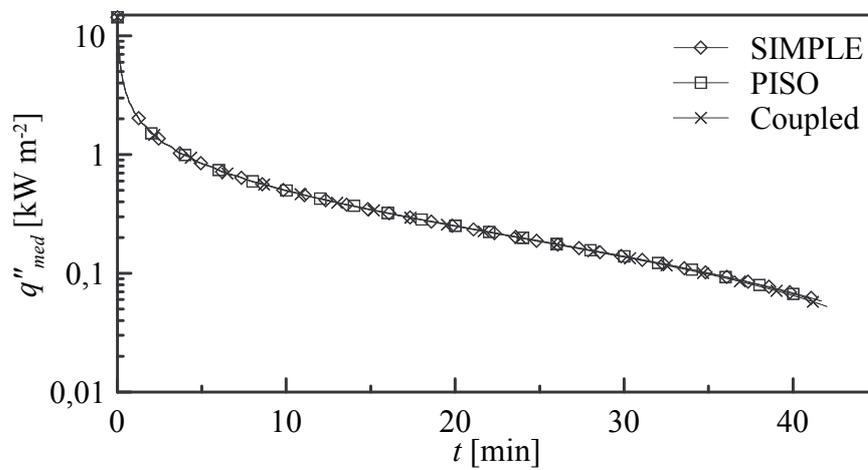
6 – Fluxo de calor médio para os testes de discretização espacial.



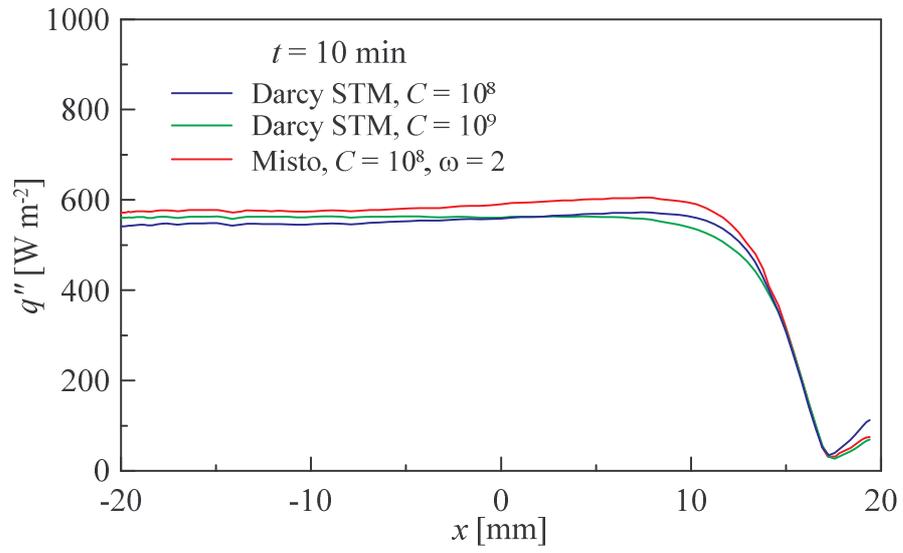
7 – Fluxo de calor médio para os testes de discretização temporal.



8 – Fluxo de calor médio para os métodos de acoplamento pressão-velocidade testados.

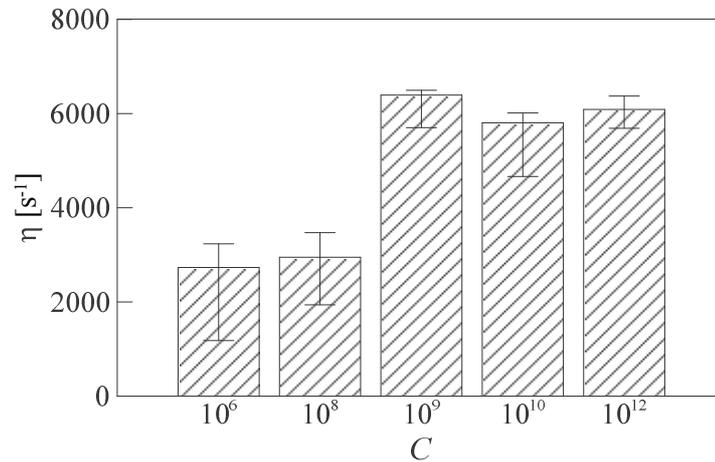


9 – Fluxo de calor local para os métodos Darcy STM e misto em $t = 10$ min.

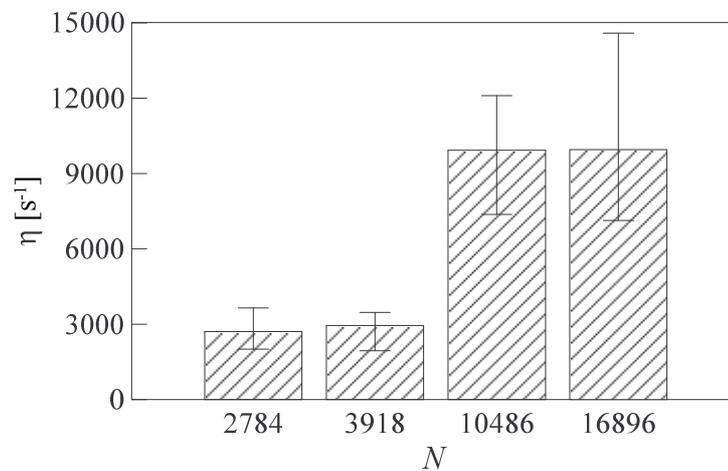


APÊNDICE C – GRÁFICOS ADICIONAIS DE DESEMPENHO DAS SIMULAÇÕES

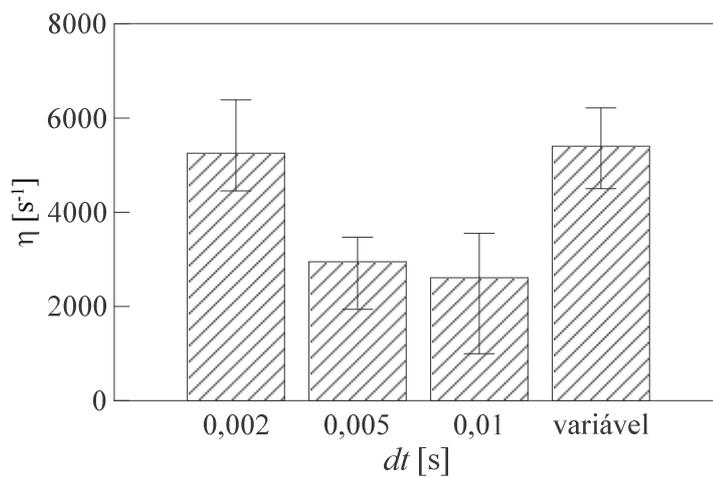
1 – Taxa de resolução no processo de solidificação com o método Darcy STM para diferentes valores de C (executadas em computadores com configurações diferentes).



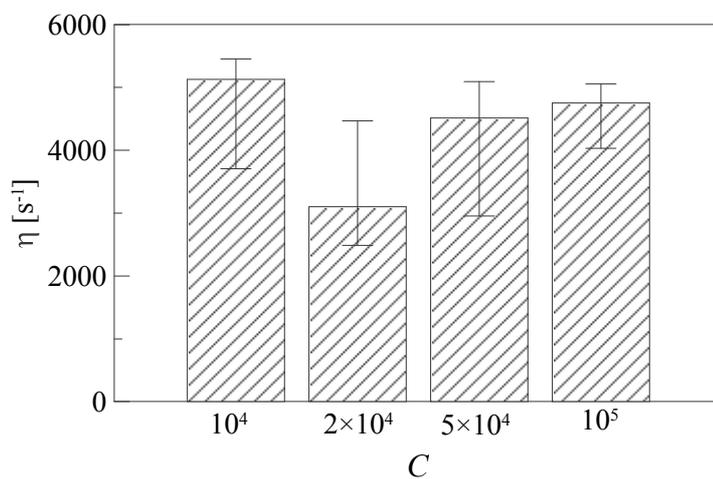
2 – Taxa de resolução no processo de solidificação com o método Darcy STM para diferentes malhas (executadas em computadores com configurações diferentes).



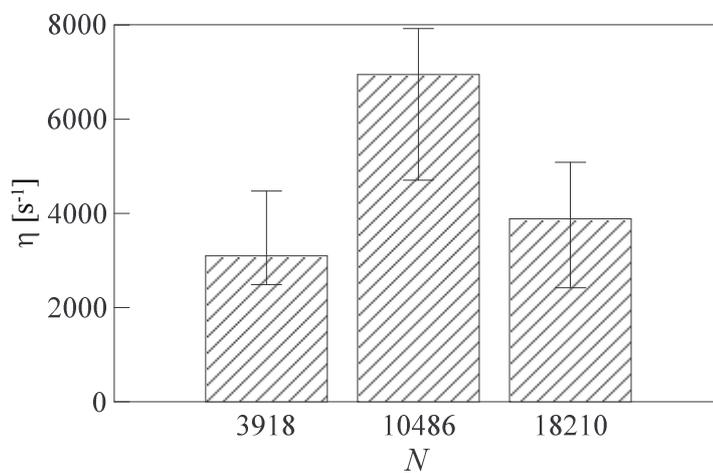
3 – Taxa de resolução no processo de solidificação com o método Darcy STM para diferentes dt (executadas em computadores com configurações diferentes).



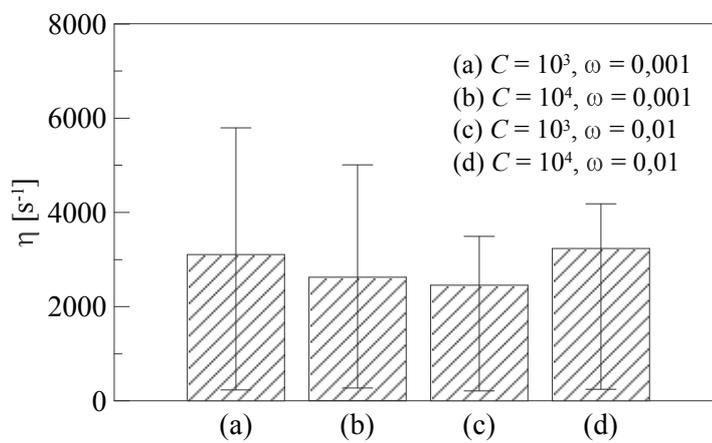
4 – Taxa de resolução no processo de fusão com o método Darcy STM para diferentes valores de C .



5 – Taxa de resolução no processo de fusão com o método Darcy STM para diferentes malhas testadas.

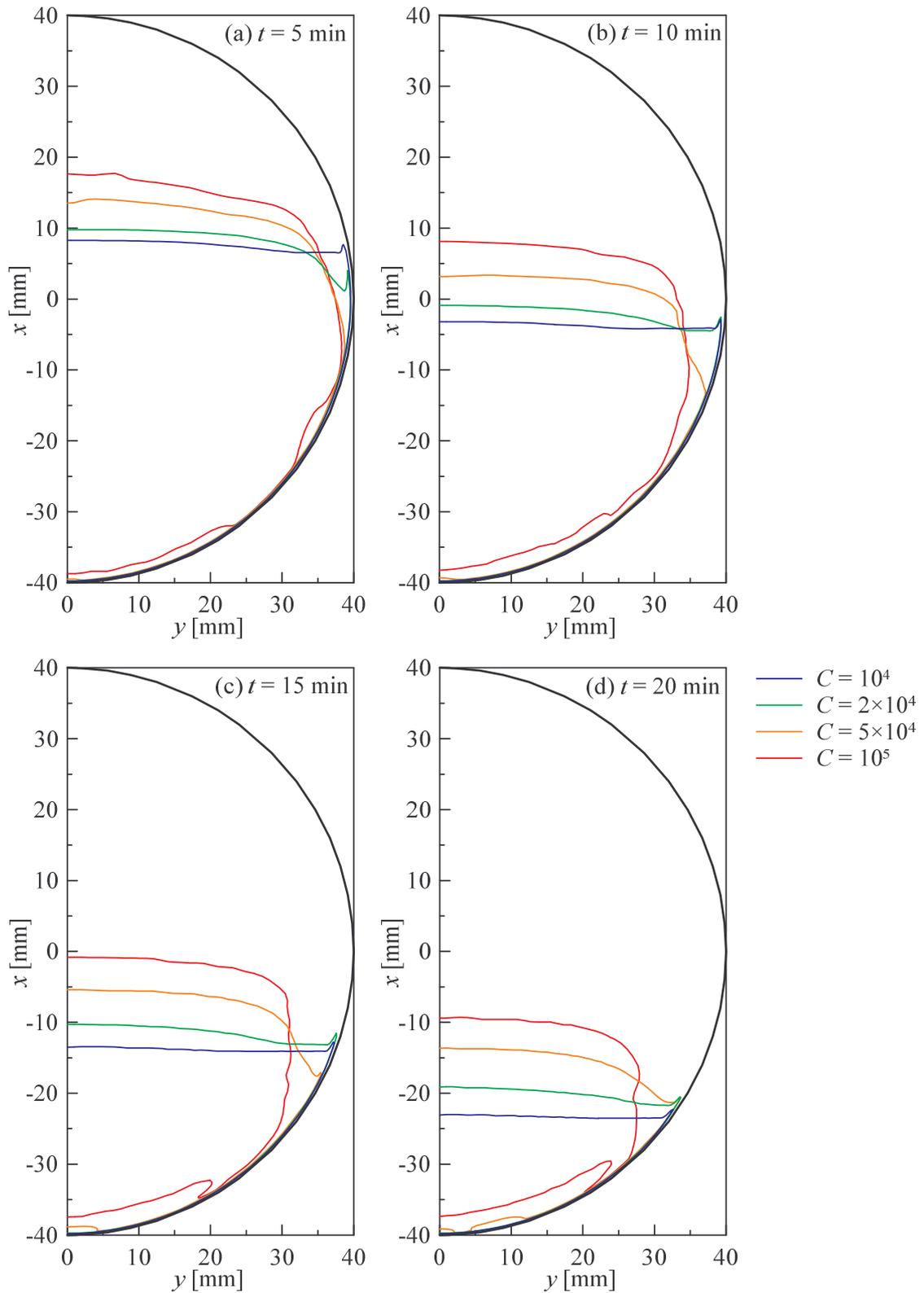


6 – Taxa de resolução no processo de fusão com o método misto para as configurações testadas.

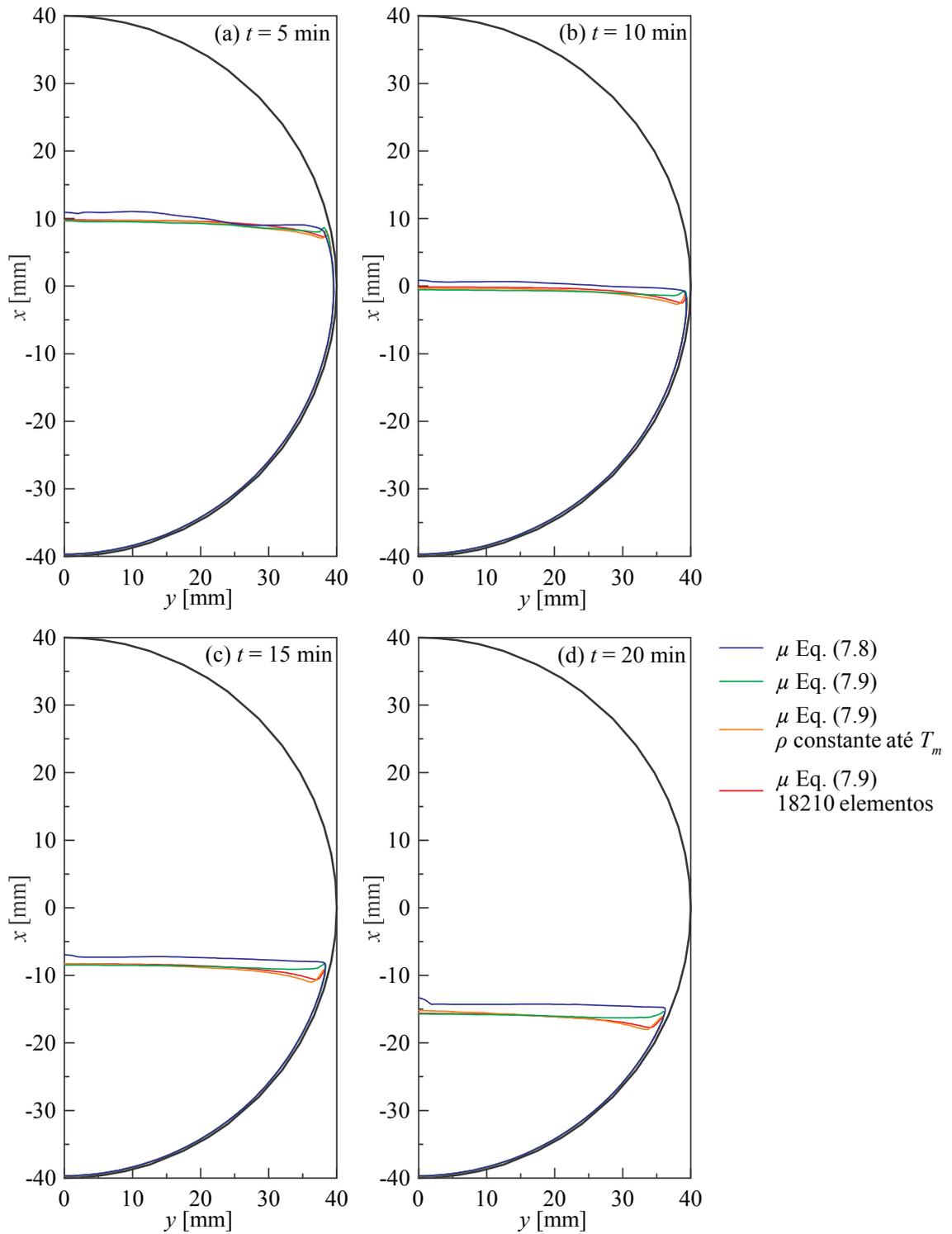


APÊNDICE D – FORMATO DO SÓLIDO E IMAGENS ADICIONAIS DO PROCESSO DE FUSÃO

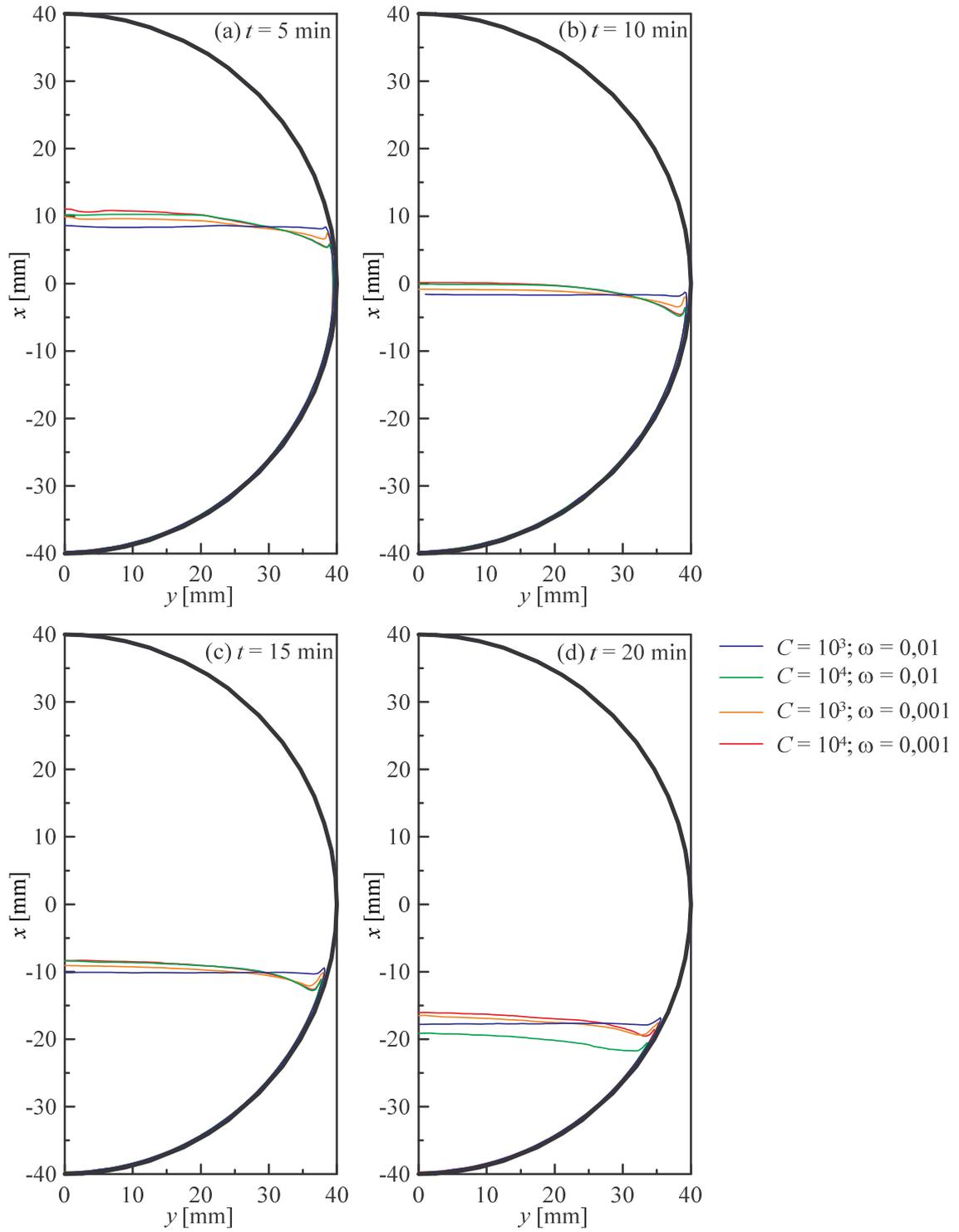
1 - Formato do sólido para o método Darcy STM



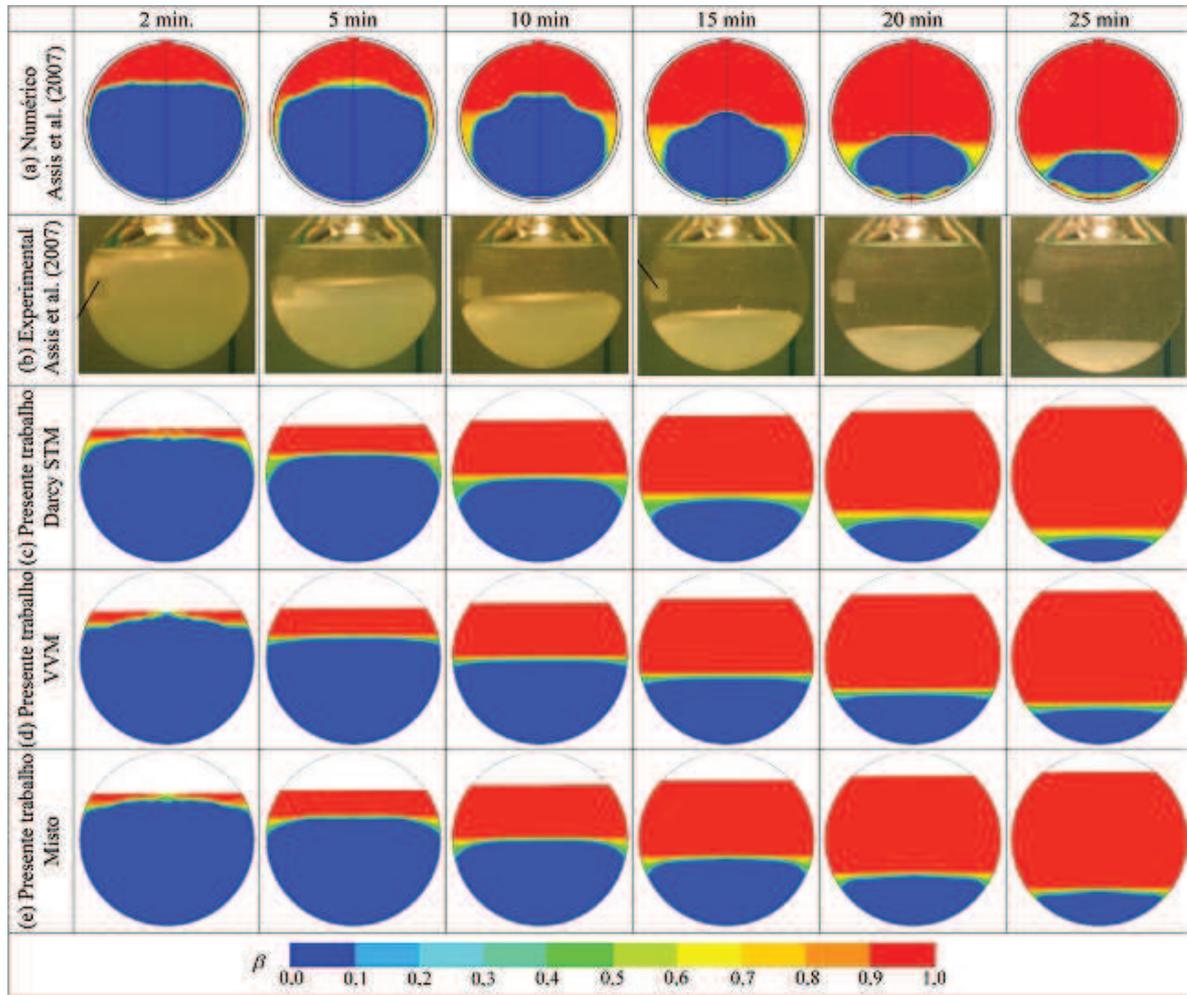
2 - Formato do sólido para o método VVM.



3 - Formato do sólido para o método misto.

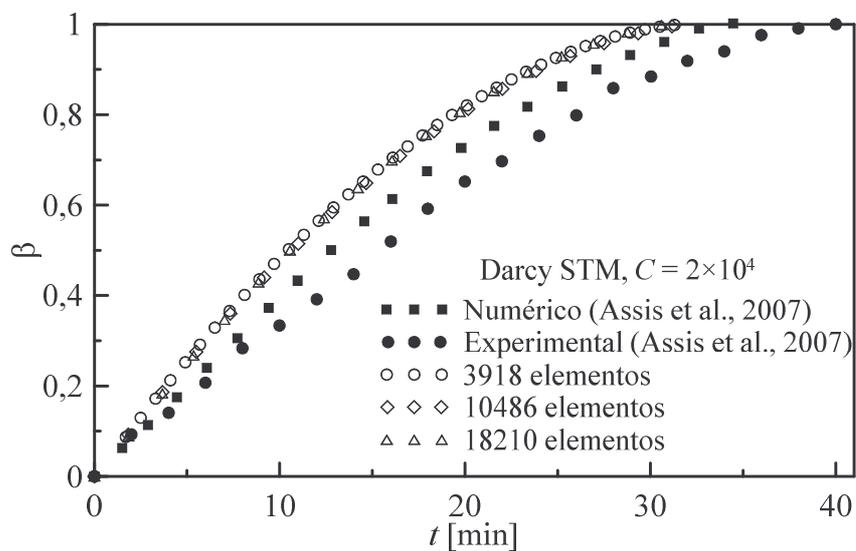


4 – Campos de fração líquida das melhores configurações com cada método em comparação com resultados experimentais e numéricos de Assis et al. (2007)

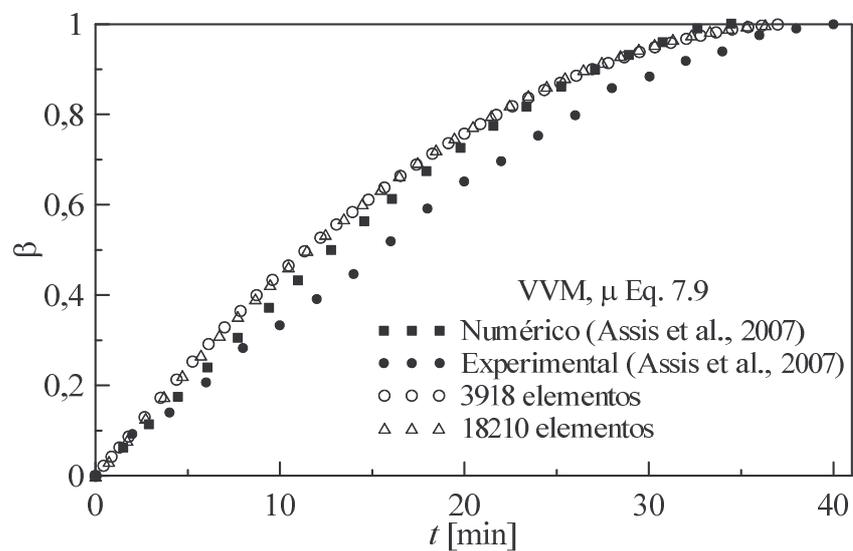


APÊNDICE E – GRÁFICOS ADICIONAIS DE FRAÇÃO LÍQUIDA E FLUXO DE CALOR NO PROCESSO DE FUSÃO

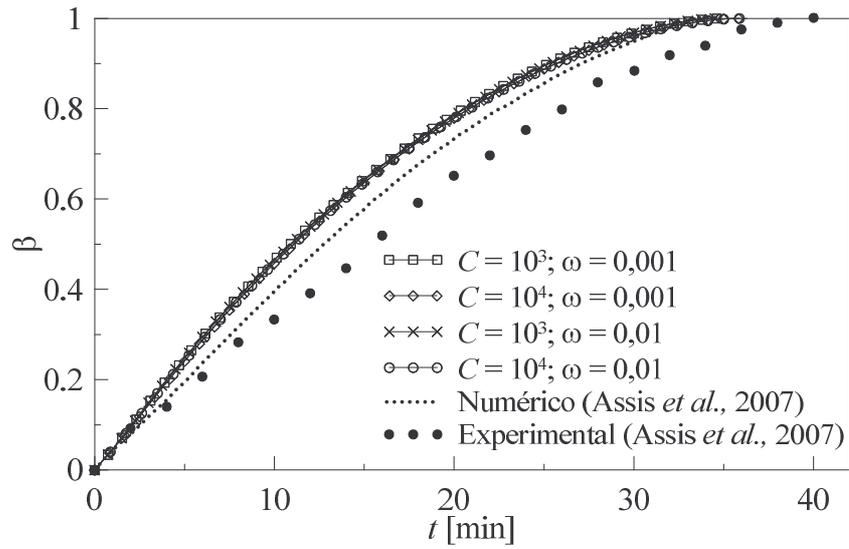
1 – Fração líquida vs. tempo para 3 malhas com o método Darcy STM



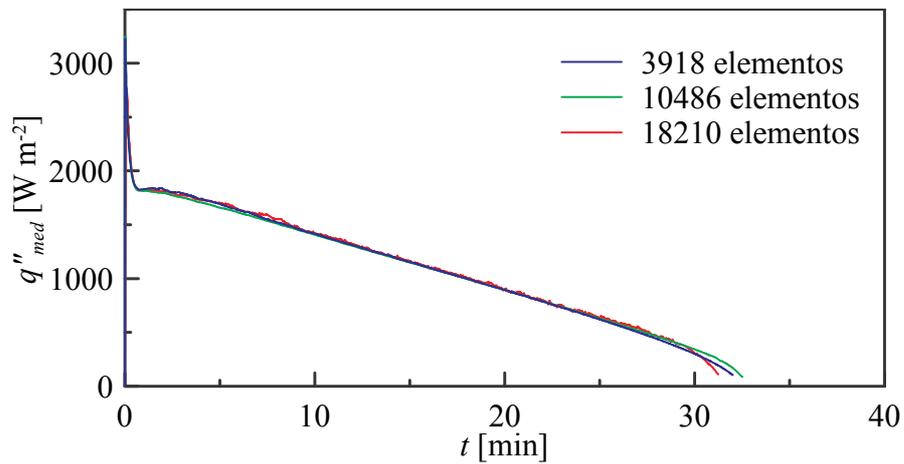
2 – Fração líquida vs. tempo para 2 malhas com o método VVM.



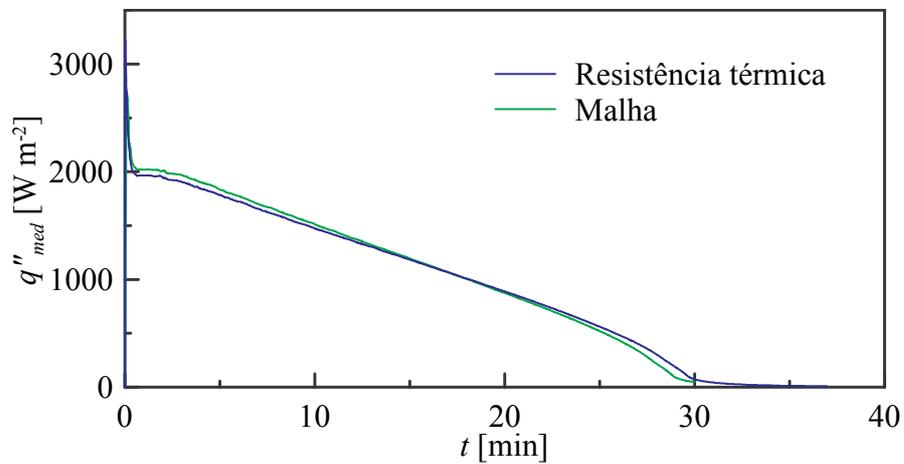
3 – Fração líquida vs. tempo para as configurações testadas no método misto.



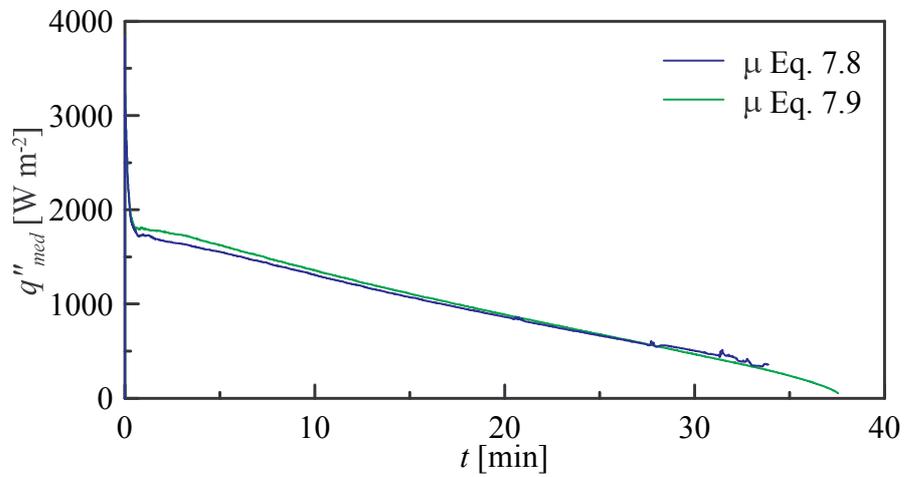
4 – Fluxo de calor médio ao longo do tempo para as malhas testadas no método Darcy STM



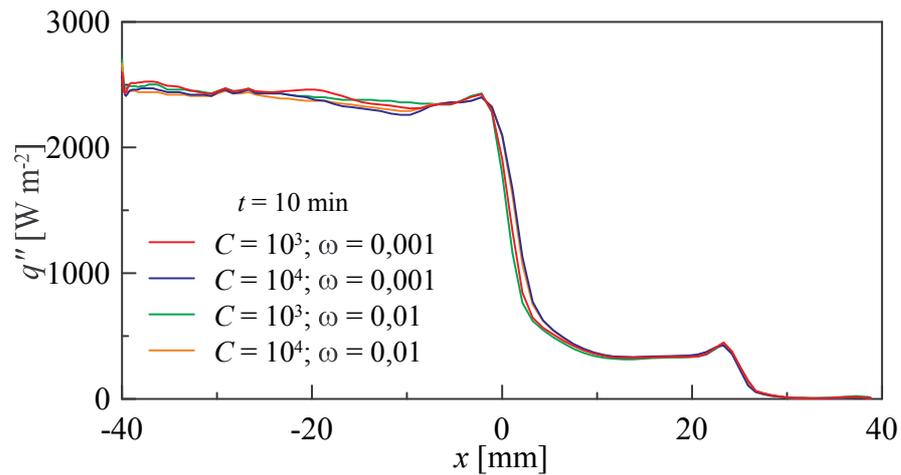
5 – Fluxo de calor médio ao longo do tempo para as modelagens da parede, com o método Darcy STM



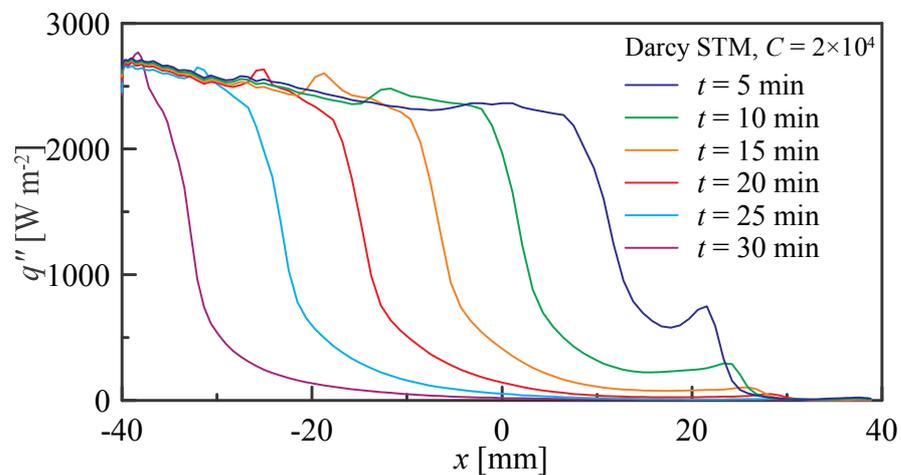
6 – Fluxo de calor médio ao longo do tempo para as funções utilizadas para descrever a viscosidade no método VVM.



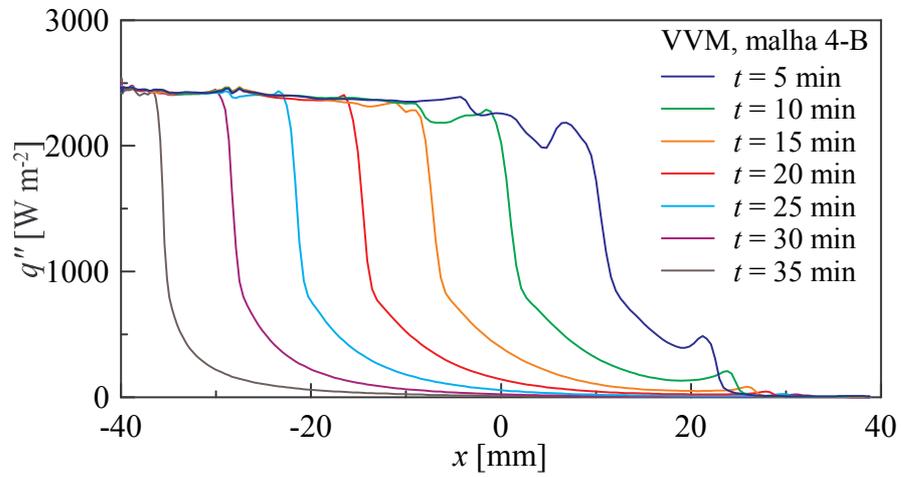
7 – Fluxo de calor local em $t = 10$ min para as configurações testadas no método misto.



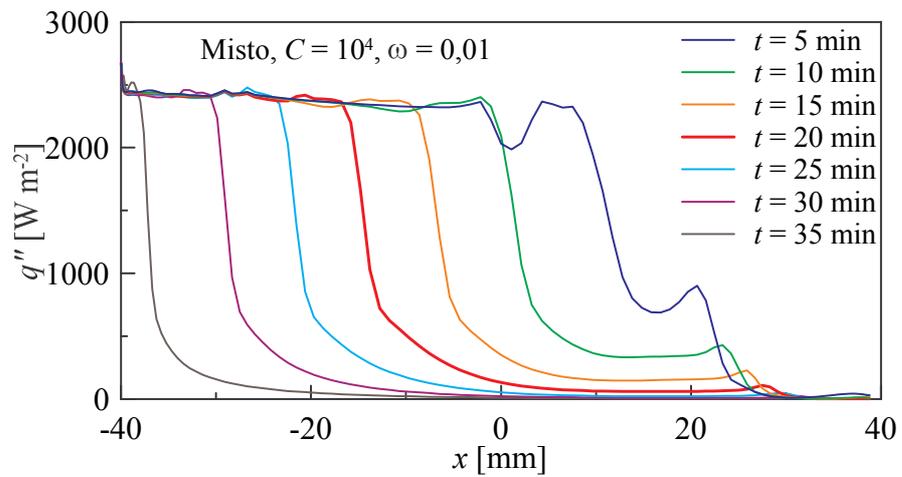
8 – Fluxo de calor em função da posição para diferentes instantes de tempo no método Darcy STM com $C = 2 \times 10^4$.



9 – Fluxo de calor em função da posição para diferentes instantes de tempo no método VVM com a malha 4-B.

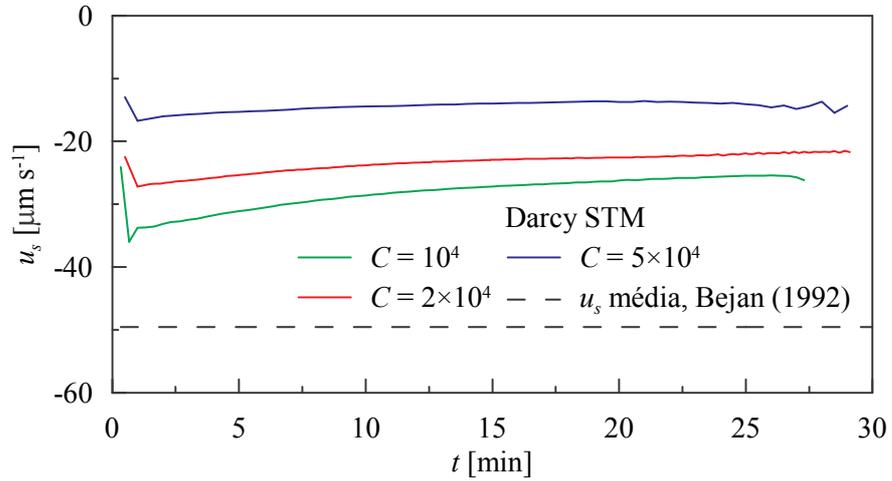


10 – Fluxo de calor em função da posição para diferentes instantes de tempo no método misto com $C = 10^4$ e $\omega = 0,01$.

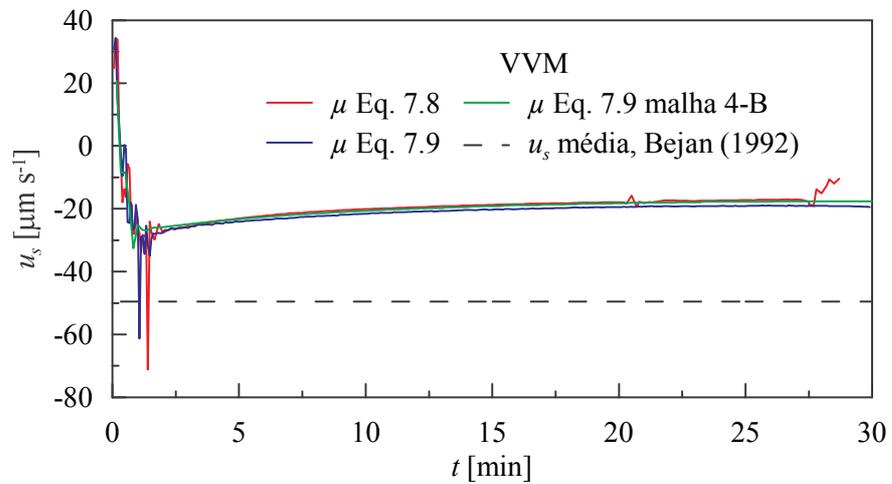


**APÊNDICE F – GRÁFICOS ADICIONAIS DOS RESULTADOS NA CAMADA
LÍQUIDA NO PROCESSO DE FUSÃO**

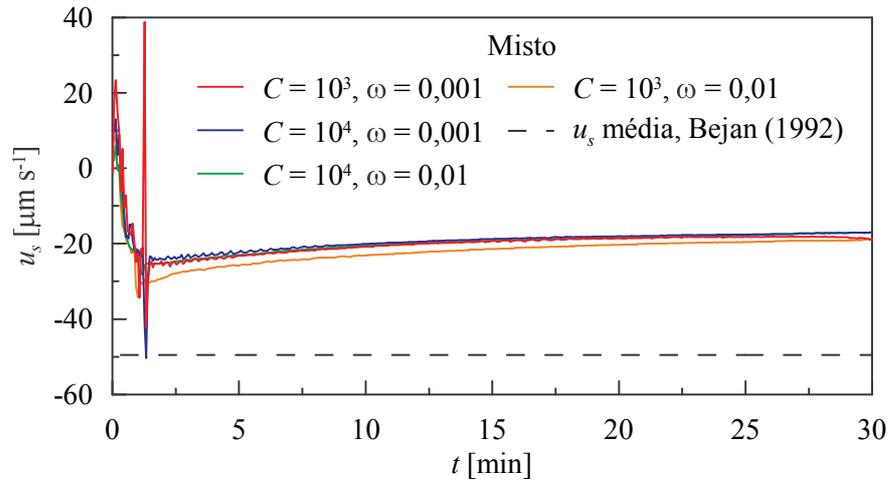
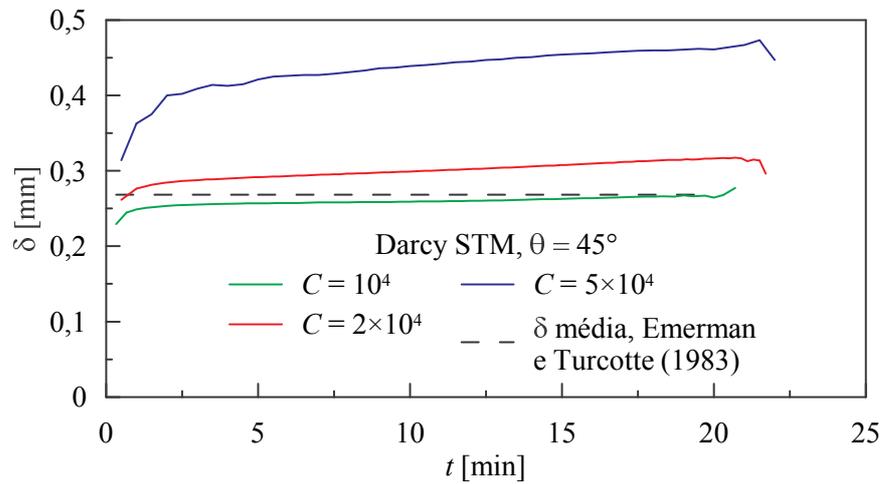
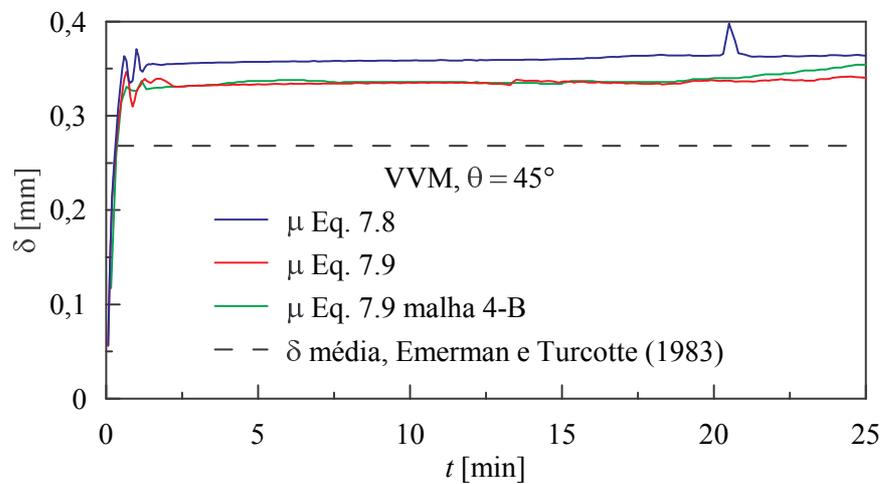
1 – Velocidade da porção sólida no método Darcy STM.

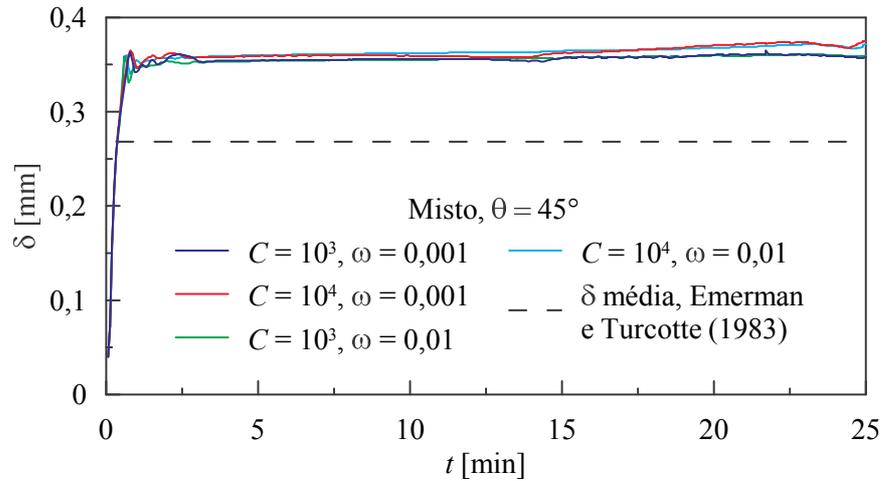
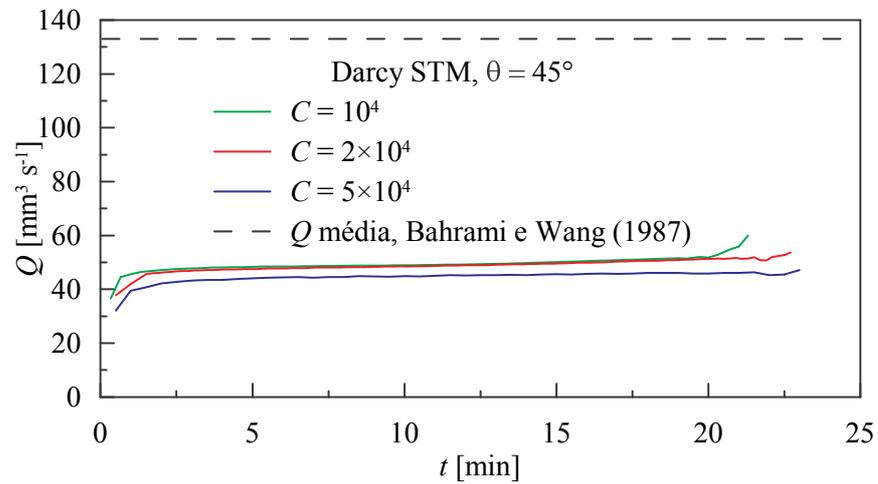
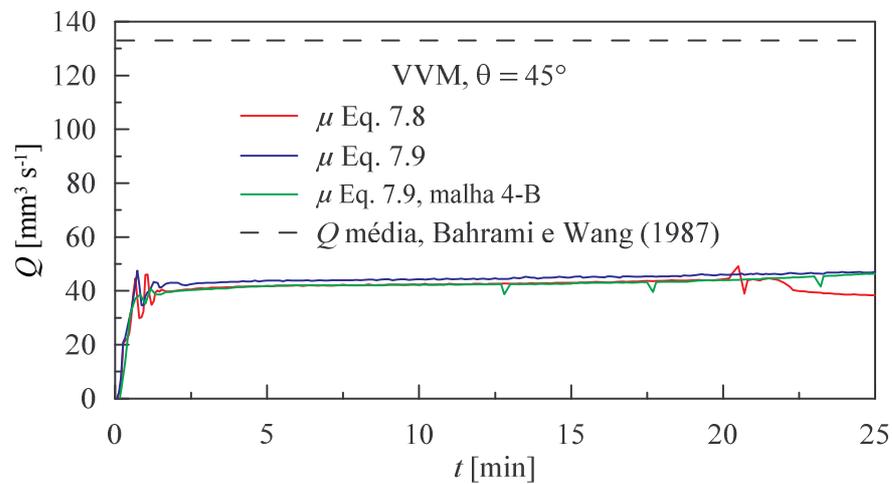


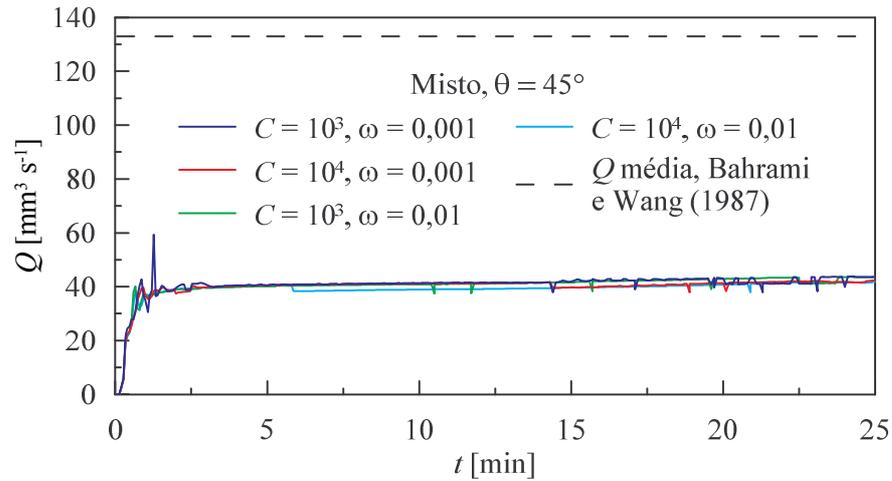
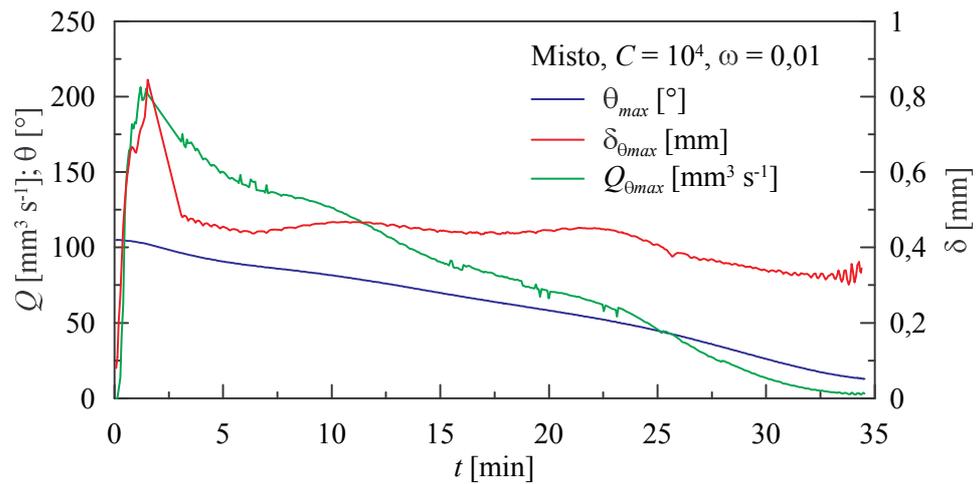
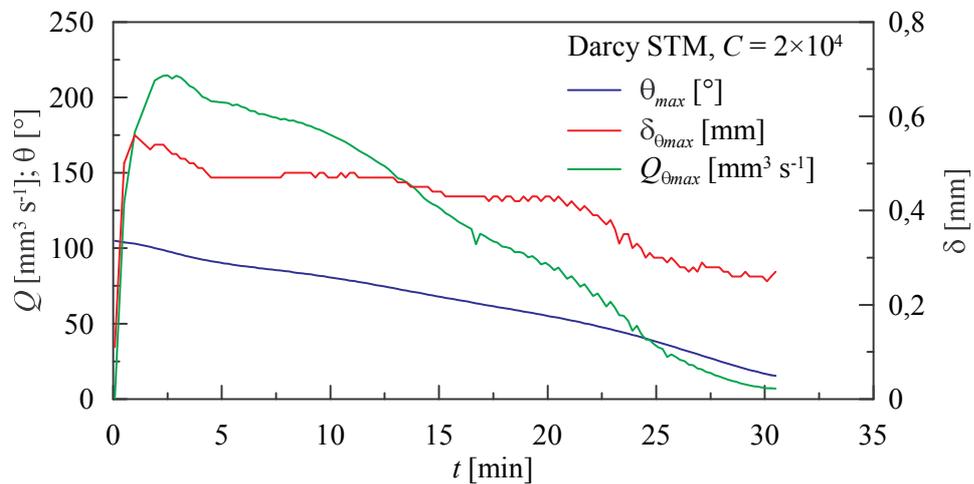
2 – Velocidade da porção sólida no método VVM.



3 – Velocidade da porção sólida no método misto.

4 – Espessura da camada líquida em $\theta = 45^\circ$ no método Darcy STM.5 – Espessura da camada líquida em $\theta = 45^\circ$ no método VVM.

6 – Espessura da camada líquida em $\theta = 45^\circ$ no método misto.7 – Vazão na camada líquida em $\theta = 45^\circ$ no método Darcy STM.8 – Vazão na camada líquida em $\theta = 45^\circ$ no método VVM.

9 – Vazão na camada líquida em $\theta = 45^\circ$ no método misto.10 – Posição angular, espessura e vazão na região final da camada líquida para o método misto, com $C = 10^4$ e $\omega = 0,01$.11 – Posição angular, espessura e vazão na região final da camada líquida para o método Darcy STM com $C = 2 \times 10^4$.

ANEXO A – MÉTODO DE CÁLCULO DO GCI

O método de avaliação através do GCI (Grid Convergence Index) é aplicado a grupos de três malhas com números diferentes de elementos, no qual os resultados são ponderados pelo tamanho representativo da malha “j” (A_j), onde j assume o valor 1 para a malha mais refinada, 2 para a intermediária e 3 para a malha menos refinada. No caso de variáveis globais, tais como a fração líquida no domínio bidimensional, A_j é definido para cada malha utilizada através da Eq. (A.1) (Celik et al., 2008).

$$A_j = \left[\frac{1}{N_i} \sum_{i=1}^{N_i} A_i \right]^{1/2} \quad (\text{A.1})$$

onde A_i é a área do elemento “i” da malha. No caso de variáveis locais, como a espessura da camada líquida no processo de fusão, A_j é considerado como o tamanho médio dos elementos na região analisada.

A ordem aparente (op) é calculada através da Eq. (A.2)

$$op = \frac{1}{\ln(Fr_{21})} \left| \ln \left| \frac{\Delta\Phi_{32}}{\Delta\Phi_{21}} \right| + \ln(J) \right| \quad (\text{A.2})$$

onde Fr é o fator de refinamento ($Fr_{21} = A_2/A_1$; $Fr_{32} = A_3/A_2$), $\Delta\Phi$ é a diferença entre os resultados de uma variável Φ para duas malhas ($\Delta\Phi_{21} = \Phi_2 - \Phi_1$; $\Delta\Phi_{32} = \Phi_3 - \Phi_2$) e o termo J é calculado através da Eq. (A.3).

$$J = \frac{Fr_{21}^{op} - 1 [\text{sgn}(\Delta\Phi_{32}/\Delta\Phi_{21})]}{Fr_{32}^{op} - 1 [\text{sgn}(\Delta\Phi_{32}/\Delta\Phi_{21})]} \quad (\text{A.3})$$

Em seguida, é calculado o valor extrapolado da variável Φ (Φ_{ex}) através das Eq. (A.4) e (A.5).

$$\Phi_{ex,21} = \frac{Fr_{21}^{op} \Phi_1 - \Phi_2}{Fr_{21}^{op} - 1} \quad (\text{A.4})$$

$$\Phi_{ex,32} = \frac{Fr_{32}^{op} \Phi_2 - \Phi_3}{Fr_{32}^{op} - 1} \quad (A.5)$$

Os erros relativos aproximados (Er_a) são calculados utilizando as Eq. (A.6) e (A.7), enquanto os erros relativos extrapolados (Er_{ex}) são calculados através das Eq. (A.8) e (A.9).

$$Er_{a,21} = \left| \frac{\Phi_1 - \Phi_2}{\Phi_1} \right| \quad (A.6)$$

$$Er_{a,32} = \left| \frac{\Phi_2 - \Phi_3}{\Phi_2} \right| \quad (A.7)$$

$$Er_{ex,21} = \left| \frac{\Phi_{ex,21} - \Phi_1}{\Phi_{ex,21}} \right| \quad (A.8)$$

$$Er_{ex,32} = \left| \frac{\Phi_{ex,32} - \Phi_2}{\Phi_{ex,32}} \right| \quad (A.9)$$

O valor do GCI é determinado pelas Eq. (A.10) e (A.11).

$$GCI_{21} = \frac{1,25Er_{a,21}}{Fr_{21}^{op} - 1} \quad (A.10)$$

$$GCI_{32} = \frac{1,25Er_{a,32}}{Fr_{32}^{op} - 1} \quad (A.11)$$